



TITLE:

数値繰り込み群による $f^2$ 不純物アンダーソン模型の局所ランダウパラメータの研究(修士論文(2003年度))

AUTHOR(S):

服部, 一匡

---

CITATION:

服部, 一匡. 数値繰り込み群による $f^2$ 不純物アンダーソン模型の局所ランダウパラメータの研究(修士論文(2003年度)). 物性研究 2004, 83(2): 245-304

ISSUE DATE:

2004-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110059>

RIGHT:

# 数値繰り込み群による $f^2$ 不純物アンダーソン模型の 局所ランダウパラメータの研究

大阪大学大学院基礎工学研究科 服部一匡

## 目次

はじめに	246
第1章 数値繰り込み群の方法	247
1.1 アンダーソン模型に対する数値繰り込み群の方法	247
1.2 電子正孔対称な自由電子ハミルトニアン	256
1.3 電子正孔非対称な自由電子ハミルトニアン	259
1.4 強結合固定点でのエネルギースペクトル	262
1.5 強結合固定点の周りでの有効ハミルトニアン	264
1.6 物理量の表式	269
第2章 $f^2$ 系における定式化	271
2.1 実験的背景	271
2.2 結晶場ハミルトニアン	273
2.3 2軌道アンダーソン模型+異方的フント結合	277
2.4 固定点での有効ハミルトニアン	278
2.5 物理量の表式	284
第3章 二軌道局所フェルミ液体論	285
3.1 ダイアグラムの方法の準備	285
3.2 熱力学量	286
3.3 ワード恒等式を用いた計算	287
第4章 解析結果	292
4.1 繰り込み因子と準粒子間相互作用	292
4.2 擬スピンから全角運動量表示へ	299
第5章 まとめと今後の展望	300
付録A 演算子のN積	301

## はじめに

重い電子系と呼ばれる物質系は、その不純物系で生じる近藤効果の研究以来、固体物理の中でも盛んに研究がなされてきた系である。それらの大まかな現在の理解としては次のようなものである。「局所クーロン斥力が非常に強い局在的な  $f$  電子と、その  $f$  電子と混成する伝導電子があり、高温で  $f$  電子は「局在スピン」として振る舞い、温度を下げていくと近藤温度  $T_K$  程度で伝導電子と一重項を作りスピンは消失し、有効質量の極端に大きなフェルミ液体となる。」このことは、 $f$  電子が希薄な極限である ( $f$  電子の) 不純物問題を出発点にして、現在では共通の認識として認知されている所である。もちろん格子間の効果が重要な時は、上記のように単純ではない。本研究で取り上げる 1 イオン当たり  $f$  電子が 2 個存在するような系 ( $f^2$ ) においても、上記のような単純な理解を超えていることがある。 $f$  電子が 1 個しか存在しないような系 ( $f^1$ ) では、重い電子系では良い出発点と思われる不純物問題の範囲で、準粒子間相互作用  $\hat{U}$  は  $\hat{U} \sim T_K$  である。これに対し  $f^2$  の場合は不純物問題ですら、準粒子間相互作用がどのようになっているのかはあまり理解されていない。よって、本研究では  $f^2$  不純物アンダーソン模型の準粒子間相互作用定数を非摂動論的な方法である数値繰り込み群 (NRG) を用いて解析し、どのように準粒子同士が相互作用するかを調べることを目的とする。準粒子相互作用の形が不純物問題の範囲でわかれば、その相互作用とコヒーレントな準粒子部分を用いて周期系へ議論を拡張することも期待できる。

以下の構成は次のようである。1 章で、一軌道アンダーソン模型を例に数値繰り込み群の方法の説明をする。2 章では、 $f^2$  系物質の実験事実を紹介し、理論的な定式化を説明する。次に 3 章においては 2 軌道の場合の局所フェルミ液体論を説明する。そして数値繰り込み群を用いて行った計算結果を 4 章で紹介し、最後に 5 章で今後の問題点とまとめとする。

# 第1章 磁性不純物問題と数値繰り込み群の方法

## 1.1 アンダーソン模型に対する数値繰り込み群の方法

このセクションでは数値繰り込み群の方法をアンダーソン模型を例にを紹介する [1, 2, 3]。初期の段階においては、伝導電子の状態密度はフェルミ面の値で一定とした定式化しかされていなかったが、緩やかに変化する状態密度であれば拡張可能である [9]。本研究では、状態密度のエネルギー依存性や混成  $V_k$  のそれを一定とする場合しか扱わないが、定式化の時点ではエネルギー依存性を持った場合でも使えるように説明することとする。

### エネルギー表示への変換

まず、アンダーソン模型 [5] をエネルギー表示に変換することから始める。アンダーソン模型は次のようなハミルトニアンで表される。

$$H_{\text{Anderson}} = H_c + H_f + H_{\text{hyb}} \quad (1.1)$$

$$H_c = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \quad (1.2)$$

$$H_f = \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} \quad (1.3)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{\vec{k}\sigma} [V_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma} f_{\sigma} + \text{h.c.}] \quad (1.4)$$

ここで、 $c_{\vec{k}\sigma}$ ,  $f_{\sigma}$  はそれぞれスピン  $\sigma$ 、波数  $\vec{k}$  の伝導電子、スピン  $\sigma$  の  $f$  電子の消滅演算子であり、次の反交換関係を満たす。

$$\{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.5)$$

$$\{c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}'\sigma'}\} = 0 \quad (1.6)$$

$$\{f_{\sigma}, f_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.7)$$

$$\{f_{\sigma}, f_{\sigma'}\} = 0 \quad (1.8)$$

ここでは簡単のため、 $\epsilon_k$  は  $k$  の絶対値にしか依存しない場合を考える。スピンの添え字を以下では省略して話を進める。 $H_{\text{hyb}}$  内の  $k$  の和を次のように書き直す。

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k V_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger \\ &= \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \int d^3q V_{k_F \vec{q}} \left( \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} c_{k_F \vec{q}}^\dagger \right) \\ &\equiv \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \int d^3q V(\vec{q}) c^\dagger(\vec{q}) \end{aligned} \quad (1.9)$$

ここで、 $q$  はフェルミ波数  $k_F$  を単位とした波数で、 $V(\vec{q})$  はエネルギーの次元を持ち、 $c^\dagger(\vec{q})$  は無次元の量である。また  $\Omega$  は系の体積で、 $c^\dagger(\vec{q})$  はスピンも入れて、反交換関係  $\{c_\sigma(\vec{q}), c_{\sigma'}^\dagger(\vec{q}')\} = \delta(\vec{q} - \vec{q}')\delta_{\sigma\sigma'}$  等を満たす。さらに変形すると、

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \int d^3q V(\vec{q}) c^\dagger(\vec{q}) &= \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \int dq q^2 \int d\Omega_{\hat{q}} V(\vec{q}) c^\dagger(\vec{q}) \\ &= \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \sum_{lm} \int dq q^2 \frac{1}{q} c_{qlm}^\dagger \int d\Omega_{\hat{q}} V(\vec{q}) Y_{lm}^*(\Omega_{\hat{q}}) \\ &= \sqrt{\frac{\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \sqrt{4\pi} \sum_{lm} \int dq q V_{qlm} c_{qlm}^\dagger \end{aligned} \quad (1.10)$$

と書ける。ここで、フェルミオン演算子の球面波展開

$$c(\vec{q}) = q^{-1} \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega_{\hat{q}}) c_{qlm} \quad (1.11)$$

$$c_{qlm} = q \int d\Omega_{\hat{q}} Y_{lm}^*(\Omega_{\hat{q}}) c(\vec{q}) \quad (1.12)$$

と

$$V(\vec{q}) = \sqrt{4\pi} \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega_{\hat{q}}) V_{qlm} \quad (1.13)$$

$$V_{qlm} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega_{\hat{q}} Y_{lm}^*(\Omega_{\hat{q}}) V(\vec{q}) \quad (1.14)$$

を用いた。 $c(\vec{q})$  と  $V(\vec{q})$  で変換を異なるように定義したのは  $c_{qlm}$  は反交換関係  $\{c_{qlm\sigma}, c_{q'l'm'\sigma'}^\dagger\} = \delta(q - q')\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{\sigma\sigma'}$  を満たすようにしたためである。 $H_c$  も同様に変形して

$$\begin{aligned} \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_k^\dagger c_k &= \int d^3q \epsilon(q) c^\dagger(\vec{q}) c(\vec{q}) \\ &= \sum_{lm} \int dq \epsilon_q c_{qlm}^\dagger c_{qlm} \end{aligned} \quad (1.15)$$

となる。

(1.10) においては、混成  $V_{\vec{k}}$  が元々ある程度局所的なものであることと、低エネルギーに関しては s 波散乱が最も効くことを考慮して、 $l=0, m=0$  のみを残すことにする。これは不純物サイトで  $\delta$  関数的に混成する場合は厳密である ( $V_{\vec{k}}$  が一定)。このことに伴って、(1.15) に関しても、不純物と混成する  $l=0, m=0$  の項のみを残す。バンド幅  $2D$  としてエネルギーを無次元化すると、

$$\bar{H}_c \equiv H_c/D = \int dq \frac{\epsilon_q}{D} c_{q00}^\dagger c_{q00} \quad (1.16)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} \equiv H_{\text{hyb}}/D = \sqrt{\frac{4\pi\Omega k_F^3}{(2\pi)^3}} \int dq q \left[ \frac{V_{q00}}{D} c_{q00}^\dagger f + \text{h.c.} \right] \quad (1.17)$$

最後に  $q$  から  $\epsilon \equiv \epsilon_q/D$  に変数変換する。

$$\bar{H}_c = \int_{-1}^1 d\epsilon \epsilon c^\dagger(\epsilon) c(\epsilon) \quad (1.18)$$

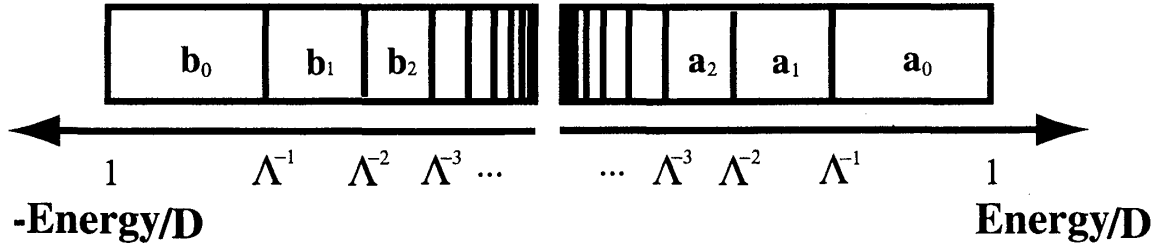


図 1.1: 伝導電子バンドの対数離散化。図は状態密度が一定の場合である。化学ポテンシャルを原点に取って、エネルギーが正と負のバンドを別々に描いている。

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = \int_{-1}^1 d\epsilon \left[ \sqrt{\frac{\bar{\Delta}(\epsilon)}{\pi}} c^\dagger(\epsilon) f + \text{h.c.} \right] \quad (1.19)$$

$$c(\epsilon) \equiv \frac{V_{q00}^*}{|V_{q00}|} \sqrt{\frac{dq}{d\epsilon}} c_{q00} \quad (1.20)$$

$$\bar{\Delta}(\epsilon) \equiv \pi \frac{4\pi\Omega k_F^3}{(2\pi)^3} \frac{dq}{d\epsilon} q^2 \left[ \frac{|V_{q00}|}{D} \right]^2 = \pi \rho(\epsilon) \left[ \frac{|V_{q(\epsilon)00}|}{D} \right]^2 \quad (1.21)$$

$\rho(\epsilon)$  は伝導電子のスピンあたりの状態密度である。また、 $c(\epsilon)$  は反交換関係  $\{c_\sigma(\epsilon), c_{\sigma'}^\dagger(\epsilon')\} = \delta(\epsilon - \epsilon')\delta_{\sigma\sigma'}$  等を満たす。また、 $\bar{U} = U/D, \bar{\epsilon}_f = \epsilon_f/D$  と表すと、

$$\bar{H}_c = \sum_\sigma \int_{-1}^1 d\epsilon \epsilon c_\sigma^\dagger(\epsilon) c_\sigma(\epsilon) \quad (1.22)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = \sum_\sigma \int_{-1}^1 d\epsilon \left[ \sqrt{\frac{\bar{\Delta}(\epsilon)}{\pi}} c_\sigma^\dagger(\epsilon) f_\sigma + \text{h.c.} \right] \quad (1.23)$$

$$\bar{H}_f = \sum_\sigma \bar{\epsilon}_f f_\sigma^\dagger f_\sigma + \bar{U} n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} \quad (1.24)$$

以上により、無次元化された形でアンダーソンハミルトニアンをエネルギー表示に変換することができた。

### 伝導電子バンドの対数離散化

数値計算をするに当たり、連続的に無限の自由度を持つ伝導電子バンドは何らかの離散化を行わなければならない。しかし、等間隔に離散化したのでは、低エネルギーの状態を再現するのに膨大なメモリが必要となる。そこで図 1.1 のように伝導電子バンドを対数的に離散化する [1]。状態密度や混成がエネルギー依存性を持つ場合の導出は [9, 10] に従う。離散化のパラメータ  $\Lambda$  は通常 2-3 を取る。当然  $\Lambda \rightarrow 1$  が元の連続極限になる。

離散化した後に、区間  $[\Lambda^{-n-1}, \Lambda^{-n}]$  において伝導電子の消滅演算子を正規完全直交系  $\phi_{nj}^+(\epsilon)$ 、区間  $[-\Lambda^{-n}, -\Lambda^{-n-1}]$  においては  $\phi_{nj}^-(\epsilon)$  を用いて展開する。

$$c(\epsilon) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \phi_{nj}^+(\epsilon) a_{nj} \quad \text{for } \Lambda^{-n-1} < \epsilon \leq \Lambda^{-n} \quad (1.25)$$

$$c(\epsilon) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \phi_{nj}^-(\epsilon) b_{nj} \quad \text{for } -\Lambda^{-n} \geq \epsilon > -\Lambda^{-n-1} \quad (1.26)$$

NRG の方法をエネルギー依存性を持たせた状態密度と混成に拡張するのに重要な点は、この正規完全直交系の  $\phi_{n0}^{\pm}$  を対応する区間の  $\sqrt{\bar{\Delta}(\epsilon)/\pi}$  のエネルギー依存性と同じ依存性を持つように定義することである。

$$\phi_{n0}^+(\epsilon) = \frac{1}{F_n^+} \sqrt{\frac{\bar{\Delta}(\epsilon)}{\pi}} \quad \text{for} \quad \Lambda^{-n-1} < \epsilon \leq \Lambda^{-n} \quad (1.27)$$

$$\phi_{n0}^+(\epsilon) = 0 \quad \text{otherwise} \quad (1.28)$$

$$\phi_{n0}^-(\epsilon) = \frac{1}{F_n^-} \sqrt{\frac{\bar{\Delta}(\epsilon)}{\pi}} \quad \text{for} \quad -\Lambda^{-n} \geq \epsilon > -\Lambda^{-n-1} \quad (1.29)$$

$$\phi_{n0}^-(\epsilon) = 0 \quad \text{otherwise} \quad (1.30)$$

$$F_n^{\pm 2} = \frac{1}{\pi} \int^{\pm n} d\epsilon \bar{\Delta}(\epsilon) \quad (1.31)$$

ここで記号  $\int^{\pm n}$  は

$$\int^{+n} \equiv \int_{\Lambda^{-n-1}}^{\Lambda^{-n}}, \quad \int^{-n} \equiv \int_{-\Lambda^{-n}}^{-\Lambda^{-n-1}} \quad (1.32)$$

を表す。上記の変換から

$$\bar{H}_c = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{jk} \left[ \int^{+n} d\epsilon \epsilon \phi_{nj}^{+*}(\epsilon) \phi_{nk}^+(\epsilon) a_{nj}^{\dagger} a_{nk} + \int^{-n} d\epsilon \epsilon \phi_{nj}^{-*}(\epsilon) \phi_{nk}^-(\epsilon) b_{nj}^{\dagger} b_{nk} \right] \quad (1.33)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ (F_n^+ a_{n0}^{\dagger} + F_n^- b_{n0}^{\dagger}) f + \text{h.c.} \right] \quad (1.34)$$

となる。伝導電子は不純物電子の  $j=0$  の軌道としか混成しない。よって、Wilson が行った単純化を  $\Delta(\epsilon)$  のエネルギー依存性がある場合にも拡張して、(1.33) 内の  $j \neq k$  を結ぶ結合は  $\Lambda \rightarrow 1$  の極限で消滅すると仮定する。事実  $\Delta(\epsilon) = \text{const.}$  の場合は、正規完全直交系をフーリエ級数にとって直接証明できる [1]。これにより、伝導電子の内の不純物と混成する  $j=0$  の軌道だけを残すことが正当化される。よって、ハミルトニアンは次のように書き直される。

$$\bar{H}_c = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \xi_n^+ a_{n0\sigma}^{\dagger} a_{n0\sigma} + \xi_n^- b_{n0\sigma}^{\dagger} b_{n0\sigma} \right] \quad (1.35)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ (F_n^+ a_{n0\sigma}^{\dagger} + F_n^- b_{n0\sigma}^{\dagger}) f_{\sigma} + \text{h.c.} \right] \quad (1.36)$$

$$\bar{H}_f = \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \bar{U} n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} \quad (1.37)$$

$$\xi_n^{\pm} = \frac{1}{\pi F_n^{\pm}} \int^{\pm n} d\epsilon \epsilon \bar{\Delta}(\epsilon) = \frac{\int^{\pm n} d\epsilon \epsilon \bar{\Delta}(\epsilon)}{\int^{\pm n} d\epsilon \bar{\Delta}(\epsilon)} \quad (1.38)$$

## 1 次元鎖ハミルトニアンへの変換

離散化した伝導電子ハミルトニアンをさらに 1 次元の無限鎖ホッピング型のものに変換する。 $a_{n0}, b_{n0}$  をそれぞれ  $a_n, b_n$  と書くことにする。

$$\bar{H}_c = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \epsilon_n f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma} + t_n (f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma}) \right] \quad (1.39)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = v \sum_{\sigma} [f_{\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma} + f_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}] \quad (1.40)$$

$$f_{0\sigma} = \frac{1}{v} \sum_m [F_m^{+} a_{m\sigma} + F_m^{-} b_{m\sigma}] \quad (1.41)$$

$$v^2 = \sum_{n=0}^{\infty} [F_n^{+2} + F_n^{-2}] = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \bar{\Delta}(\epsilon) \quad (1.42)$$

に変換する。 $f_{0\sigma}$  は反交換関係  $\{f_{0\sigma}, f_{0\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma\sigma'}$  を満たす。 $f_n$  ( $n > 0$ ) については、

$$\{f_{n\sigma}, f_{n'\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.43)$$

$$\{f_{n\sigma}, f_{n'\sigma'}\} = 0 \quad (1.44)$$

$$(1.45)$$

となるように、直交変換

$$f_{n\sigma} = \sum_m [u_{nm}^{+} a_{m\sigma} + u_{nm}^{-} b_{m\sigma}] \quad (1.46)$$

$$a_{m\sigma} = \sum_n u_{nm}^{+} f_{n\sigma} \quad (1.47)$$

$$b_{m\sigma} = \sum_n u_{nm}^{-} f_{n\sigma} \quad (1.48)$$

を求める。 $u_{nm}^{\pm}$  は次の条件を満たすものである。

$$\sum_n u_{nm}^{\pm} u_{nm'}^{\pm} = \delta_{mm'} \quad (1.49)$$

$$\sum_n u_{nm}^{\pm} u_{nm'}^{\mp} = 0 \quad (1.50)$$

$$\sum_m \sum_{s=\pm} u_{nm}^s u_{n'm}^s = \delta_{nn'} \quad (1.51)$$

まず、(1.39) の中で、 $f_{0\sigma}$  に関する部分だけを抜き出す ( $f_{0\sigma}^{\dagger}$  ではない)。

$$[\epsilon_0 f_{0\sigma}^{\dagger} + t_0 f_{1\sigma}^{\dagger}] f_{0\sigma} \quad (1.52)$$

一方、元の表式の (1.35) の方は (1.47)(1.48) を用いれば、

$$\sum_{m=0}^{\infty} [\xi_m^{+} u_{0m}^{+} a_{m\sigma}^{\dagger} + \xi_m^{-} u_{0m}^{-} b_{m\sigma}^{\dagger}] f_{0\sigma} \quad (1.53)$$

(1.52)(1.53) を比べて、

$$t_0 f_{1\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} [(\xi_m^{+} u_{0m}^{+} - \epsilon_0 u_{0m}^{+}) a_{m\sigma}^{\dagger} + (\xi_m^{-} u_{0m}^{-} - \epsilon_0 u_{0m}^{-}) b_{m\sigma}^{\dagger}] \quad (1.54)$$

つまり、

$$t_0 u_{1m}^{+} = (\xi_m^{+} - \epsilon_0) u_{0m}^{+} \quad (1.55)$$

$$t_0 u_{1m}^{-} = (\xi_m^{-} - \epsilon_0) u_{0m}^{-} \quad (1.56)$$



と求まる。(1.55)(1.56) にそれぞれ  $u_{0m}^+, u_{0m}^-$  をかけて  $m$  で和を取って両辺を足し合わせると直交性から

$$\epsilon_0 = \sum_{m=0}^{\infty} [\xi_m^+ u_{0m}^{+2} + \xi_m^- u_{0m}^{-2}] \quad (1.57)$$

となり又、(1.55)(1.56) をそれぞれ二乗して両辺を足し合わせると、

$$t_0^2 = \sum_{m=0}^{\infty} [\xi_m^{+2} u_{0m}^{+2} + \xi_m^{-2} u_{0m}^{-2}] - \epsilon_0^2 \quad (1.58)$$

となることわかる。同様にして、順に求めていくことができる。その結果は次の漸化式で表される。

$$t_n u_{n+1m}^{\pm} = (\xi_m^{\pm} - \epsilon_n) u_{nm}^{\pm} - t_{n-1} u_{n-1m}^{\pm} \quad (1.59)$$

$$t_{-1} = 0 \quad (1.60)$$

$$u_{-1m}^{\pm} = 0 \quad (1.61)$$

$$u_{0m}^{\pm} = \frac{F_m^{\pm}}{v} \quad (1.62)$$

これらを変形して次のようにも表せる。

$$t_n^2 = \sum_m \sum_{s=\pm} [\xi_m^s u_{nm}^{s2}] - \epsilon_n^2 - t_{n-1}^2 \quad (1.63)$$

$$\epsilon_n^2 = \sum_m \sum_{s=\pm} \xi_m^s u_{nm}^{s2} \quad (1.64)$$

基本的には (1.59)(1.60)(1.61)(1.62) を数値的に解いて、 $t_n$  と  $\epsilon_n$  を求めればよいが、 $n$  が大きくなると  $u_{nm}^{\pm}$  が直交しなくなる。このため、常に求めた  $n$  個の  $u_{nm}^{\pm}$  を (1.49)(1.50)(1.51) を満たすようにシュミットの直交化法を用いて補正する。この方法により大きな  $n$  に関しても  $t_n$  と  $\epsilon_n$  を求めることができる。

以後、本研究では伝導電子の状態密度は一定で混成のエネルギー依存性を持たない模型しか扱わない。この時には解析的な表式が知られていて [1]、

$$t_n = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \frac{1 - \Lambda^{-n-1}}{\sqrt{(1 - \Lambda^{-2n-1})(1 - \Lambda^{-2n-3})}} \Lambda^{-n/2} \quad (1.65)$$

$$\sim \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-n/2} \quad \text{for } n \rightarrow \infty \quad (1.66)$$

となる。ここで、 $n$  が大きくなるにつれて、指数的にホッピング  $t_n$  が減少しているのが重要な点である。この傾向は状態密度が一定でない時においても現れる。つまり、一次元鎖の  $n$  が大きいところの寄与は非常に小さく、不純物電子とカップルする、より局所的な伝導電子軌道を効果的に取り込む形をしている。

$f$  電子の演算子を  $f_{-1\sigma}$  と書くと、ホッピング型に変換されたハミルトニアンは以下のようにまとめられる。

$$\bar{H}_c = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} [\epsilon_n f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma} + t_n (f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma})] \quad (1.67)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = v \sum_{\sigma} [f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma} + f_{0\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma}] \quad (1.68)$$

$$\bar{H}_f = \sum_{\sigma} \bar{\epsilon}_f f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + \bar{U} f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \quad (1.69)$$

## 繰り込み変換

離散化して次元鎖の形に直したとはいっても、これをそのまま対角化することは計算機の容量上不可能である。しかし、本研究で必要とする精度で各種の物理量を求めるためには、有限の部分からの寄与が系統的に分れば十分であることが以下で明らかになる。そこで伝導電子部分について、無限の和を有限に切った  $H_N$  を次のように定義する。

$$H_N \equiv \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{\sigma} \left[ \sum_{n=1}^N \Lambda^{-n/2} \tilde{\epsilon}_n f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma} + \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \tilde{t}_n (f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma}) \right] \quad (1.70)$$

$$\tilde{t}_n \equiv \Lambda^{n/2} \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} t_n \quad (1.71)$$

$$\tilde{\epsilon}_n \equiv \Lambda^{n/2} \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \epsilon_n \quad (1.72)$$

$$\bar{H}_c = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N + \sum_{\sigma} \epsilon_0 f_{0\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma} \quad (1.73)$$

(1.71)(1.72) のように  $\tilde{t}_n, \tilde{\epsilon}_n$  を定義したのは、 $t_n, \epsilon_n$  が通常は (1.66) のように  $\Lambda^{-n/2}$  で (もしくはそれより速く) 減衰するからである。また、 $H_N$  は次の漸化式を満たす。

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \sum_{\sigma} \left[ \tilde{\epsilon}_{N+1} f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + \tilde{t}_N (f_{N\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N\sigma}) \right] \quad (1.74)$$

(1.74) の第二項は常に 1 のオーダーのホッピングになっている。 $\bar{H}_{\text{hyb}}$  と  $\bar{H}_f$  もまとめるために  $H_N^{\text{tot}}$  を次のように定義する。

$$H_{-1}^{\text{tot}} = \frac{1}{\Lambda} \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \bar{H}_f \quad (1.75)$$

$$H_0^{\text{tot}} = \frac{1}{\Lambda^{1/2}} \left[ \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \bar{H}_{\text{hyb}} + \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_0 f_{0\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma} \right] + \Lambda^{1/2} H_{-1}^{\text{tot}} \quad (1.76)$$

$$H_N^{\text{tot}} = H_N + \Lambda^{(N-1)/2} \Lambda^{1/2} H_0^{\text{tot}} \quad \text{for } N \geq 1 \quad (1.77)$$

$$\bar{H} = \bar{H}_c + \bar{H}_{\text{hyb}} + \bar{H}_f = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N^{\text{tot}} \quad (1.78)$$

このように  $H_N^{\text{tot}}$  を定義すると、 $H_N^{\text{tot}}$  も漸化式

$$H_{N+1}^{\text{tot}} = \Lambda^{1/2} H_N^{\text{tot}} + \sum_{\sigma} \left[ \tilde{\epsilon}_{N+1} f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + \tilde{t}_N (f_{N\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N\sigma}) \right] \quad (1.79)$$

を満たす。漸化式 (1.79) を繰り込み変換  $\mathcal{R}$  を用いて次のようにも書く。

$$\begin{aligned} \mathcal{R} H_N^{\text{tot}} &\equiv H_{N+1}^{\text{tot}} \\ &= \Lambda^{1/2} H_N^{\text{tot}} + \sum_{\sigma} \left[ \tilde{\epsilon}_N f_{N\sigma}^{\dagger} f_{N\sigma} + \tilde{t}_N (f_{N\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N\sigma}) \right] \end{aligned} \quad (1.80)$$

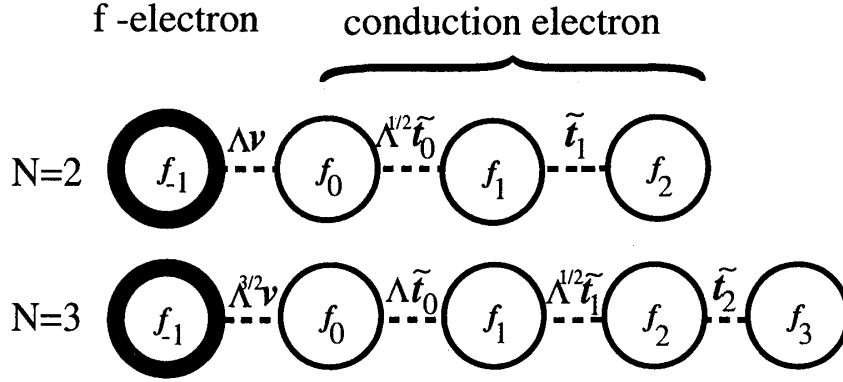


図 1.2:  $N=2$  と  $N=3$  の逐次近似における系のハミルトニアン。常に一番右端のカップリングが  $\sim 1$  のオーダーになっている。

次にどのようにして、元のハミルトニアンの真の固有状態を求めるのかを説明する。まず、 $H_{-1}^{\text{tot}}$  を対角化する。次に、得られた固有エネルギーを  $\Lambda^{1/2}$  倍に拡大して、(1.76) のように  $f_0$  に関する項を付け加えたハミルトニアン  $H_0^{\text{tot}}$  を対角化する。エネルギー固有値を  $\Lambda^{1/2}$  倍に拡大し、 $f_1$  に関する項をつけて  $H_1^{\text{tot}}$  を対角化する... と、十分に大きい  $N$  まで繰り返す。この操作は  $t_n, \epsilon_n$  が  $\Lambda^{-n/2}$  のような依存性を持っているので良い近似となりうる。つまり、新しく付け加えられる (1.79) の第二項は、第一項に対して  $\Lambda^{-1/2}$  だけ小さいエネルギースケールの摂動になっている。poor man's scaling [6] や、通常の繰り込み群での高エネルギー散乱を相互作用定数に繰り込むことは、ここでは (1.79) の第一項を対角化することに対応している。また、 $\Lambda^{1/2}$  倍に拡大することは通常の繰り込み群で言うところの長さの単位をスケールしなおすことに対応している。これらのことが——対数離散化した伝導電子バンドを使って色々とハミルトニアンを変換してきたが——この方法を NRG と呼ぶ所以である。つまるところ、繰り込み変換  $\mathcal{R}$  は、

「すでに得られている  $H_N^{\text{tot}}$  の固有値を全て  $\Lambda^{1/2}$  倍に拡大して、摂動項を付け加えたハ

ミルトニアンを対角化し  $H_{N+1}^{\text{tot}}$  の固有値、固有状態を得ること」

である。またこれに付け加える形で、得られた  $H_N^{\text{tot}}$  の固有エネルギーは全て  $H_N^{\text{tot}}$  の基底状態のエネルギーを差し引いておく。つまり、 $N$  ステップ目の基底状態のエネルギーが常に 0 に規格化しておく。この操作を繰り返していくと、何らかの固定点におけるエネルギースペクトルが得られる。この場合の固定点とは、繰り込みを行っても得られるエネルギースペクトルが変化しない状態を言う。このことは実際の計算の段階で紹介する。

### 具体的な逐次対角化の方法

具体的な計算には  $H_N^{\text{tot}}$  を用いる。実際には状態を同定するために、各状態の量子数を保存しておかなければならない。アンダーソン模型でスピン空間に異方性がある場合が説明としてわかりやすい。その場合には、保存量は全スピンの  $z$  成分  $S_z$  と全電荷  $Q$  である (電子正孔対称性がある場合には軸性電荷も保存量となる [11])。全電荷といっても NRG の場合はハーフフィリングからのずれで表すのが慣習である。

$$2S_z = \sum_{n=-1}^N [f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\uparrow} - f_{n\downarrow}^\dagger f_{n\downarrow}] \quad (1.81)$$

$$Q = \sum_{n=-1}^N \left[ f_{n\uparrow}^\dagger f_{n\uparrow} + f_{n\downarrow}^\dagger f_{n\downarrow} \right] - (N+2) \quad (1.82)$$

よって  $H_N^{\text{tot}}$  の固有状態を次のように書く。

$$|\alpha_N\rangle_N = |E_N, Q, S_z, r_N\rangle_N \quad (1.83)$$

ここで  $E, r$  はそれぞれ状態の固有エネルギーと縮退がある場合の  $Q, S_z$  以外の指標で、 $\alpha_N$  は  $E_N, Q, S_z, r_N$  の情報を全て含んだ指標である。

今 (1.83) が得られたとする。逐次対角化の手続きは以下のである。

- (1.83) と、新しい自由度  $f_{N+1\sigma}$  の状態との直積表現で  $H_{N+1}^{\text{tot}}$  の「基底」を作る。
- その基底を用いて、 $H_{N+1}^{\text{tot}}$  のハミルトニアン行列を構成する。
- $H_{N+1}^{\text{tot}}$  を対角化し、固有状態  $|E, Q, S, r\rangle_{N+1}$  とその固有エネルギーを得る。
- 全てのエネルギー固有値の値から  $N$  ステップでの基底状態のエネルギーを差し引いておく。
- 以上の繰り返し。

まず最初のステップを説明する。 $f_{N+1\sigma}$  を用いて構成できる状態は以下の4つである。

指標 $k$	表記	演算子	$\delta Q^{(k)}$	$2\delta S_z^{(k)}$
1	$\hat{X}_1$	1	-1	0
2	$\hat{X}_2$	$f_{N+1\uparrow}^\dagger$	0	1
3	$\hat{X}_3$	$f_{N+1\downarrow}^\dagger$	0	-1
4	$\hat{X}_4$	$f_{N+1\uparrow}^\dagger f_{N+1\downarrow}^\dagger$	1	0

$\delta Q^{(k)}, \delta S_z^{(k)}$  はそれぞれ直積を作ることによって元の電荷、スピンからどれだけ変化するかの変化量である。これらを用いて  $N+1$  ステップの基底を作る。その基底を次のように書く。

$$\hat{X}_k \otimes |\alpha_N\rangle_N = \hat{X}_k |0\rangle_{N+1} \otimes |E_N, Q, S_z, r_N\rangle_N \quad (1.84)$$

$$\equiv |E_N, Q + \delta Q, S_z^{(k)} + \delta S_z^{(k)}, r_N; k_{N+1}\rangle_{N+1} \quad (1.85)$$

$$\equiv |\alpha_N; k_{N+1}\rangle_{N+1} \quad (1.86)$$

また、 $H_N^{\text{tot}}$  の固有状態も線形結合の係数を  $\mathcal{U}$  として

$$|E_N, Q, S_z, r_N\rangle_N = |\alpha_N\rangle_N \quad (1.87)$$

$$= \sum_{(\alpha_{N-1}, k_N)} \mathcal{U}_{\alpha_N, (\alpha_{N-1}, k_N)} |\alpha_{N-1}; k_N\rangle_N \quad (1.88)$$

と表し、 $H_{N+1}^{\text{tot}}$  の行列要素を計算すると、

$${}_{N+1}\langle \alpha_N; k_{N+1} | H_{N+1}^{\text{tot}} | \alpha'_N; k'_{N+1} \rangle_{N+1}$$

$$\begin{aligned}
&= \delta_{\alpha_N \alpha'_N} \delta_{k_{N+1} k'_{N+1}} [\Lambda^{1/2} E_N + \tilde{\epsilon}_N (1 + \delta Q_{k'_{N+1}})] \\
&\quad + \tilde{t}_N \sum_{\sigma} N \langle \alpha_N | f_{N\sigma}^\dagger | \alpha'_N \rangle_N N+1 \langle 0 | \hat{X}_{k_{N+1}}^\dagger f_{N+1\sigma} \hat{X}_{k'_{N+1}} | 0 \rangle_{N+1} \\
&\quad + \tilde{t}_N \sum_{\sigma} N+1 \langle 0 | \hat{X}_{k_{N+1}}^\dagger f_{N+1\sigma}^\dagger \hat{X}_{k'_{N+1}} | 0 \rangle_{N+1} N \langle \alpha_N | f_{N\sigma} | \alpha'_N \rangle_N \\
&= \delta_{\alpha_N \alpha'_N} \delta_{k_{N+1} k'_{N+1}} [\Lambda^{1/2} E_N + (1 + \delta Q_{k'_{N+1}}) \tilde{\epsilon}_N] \\
&\quad + \tilde{t}_N \sum_{\sigma} \left[ M_{\alpha_N \alpha'_N \sigma} F_{k'_{N+1} k_{N+1} \sigma}^* + M_{\alpha'_N \alpha_N \sigma}^* F_{k_{N+1} k'_{N+1} \sigma} \right] \quad (1.89)
\end{aligned}$$

$$M_{\alpha_N \alpha'_N \sigma} \equiv N \langle \alpha_N | f_{N\sigma}^\dagger | \alpha'_N \rangle_N \quad (1.90)$$

$$F_{k_{N+1} k'_{N+1} \sigma} \equiv N+1 \langle 0 | \hat{X}_{k_{N+1}}^\dagger f_{N+1\sigma}^\dagger \hat{X}_{k'_{N+1}} | 0 \rangle_{N+1} \quad (1.91)$$

(1.90)(1.91) はそれぞれ次のように書ける。

$$M_{\alpha_N \alpha'_N \sigma} = \sum_{(\alpha_{N-1}, k_N)} \sum_{(\alpha'_{N-1}, k'_N)} \mathcal{U}_{\alpha_N, (\alpha_{N-1}, k_N)}^\dagger \mathcal{U}_{\alpha'_N, (\alpha'_{N-1}, k'_N)} \delta_{\alpha_{N-1} \alpha'_{N-1}} F_{k_N k'_N \sigma} \quad (1.92)$$

$$F_{k k' \sigma} = \delta_{\sigma \uparrow} [\delta_{k2} \delta_{k'1} + \delta_{k4} \delta_{k'3}] + \delta_{\sigma \downarrow} [\delta_{k3} \delta_{k'1} - \delta_{k4} \delta_{k'2}] \quad (1.93)$$

(1.92) 式の和の中では、N-1 ステップでの固有状態が等しい時のみ寄与する形になっている。ここまでで、計算をする準備は整った。数値計算を行う上で、記憶しておくべき量をまとめておく。

- $H_N^{\text{tot}}$  の固有状態は N ステップの基底の線形結合になっているのでその係数行列 (直交行列)  $\mathcal{U}$ 。
- $H_N^{\text{tot}}$  のエネルギー固有値  $E_N$ 。
- $H_N^{\text{tot}}$  の同じ量子数を持つ固有状態を区別する指標  $r_N$ 。
- $H_N^{\text{tot}}$  の固有状態の量子数の組  $(Q, 2S_z)$ 。
- N ステップの基底を構成するときに直積した  $\hat{X}_{k_N}$  の  $k_N$ 。

逐次対角化といっても、ある程度  $N$  が大きくなると、ヒルベルト空間の全状態数が計算機のメモリを越えてしまう。このため NRG ではある最大の状態数  $N_{\text{tr}}$  を設定しておき、全状態数が  $N_{\text{tr}}$  を超えるとエネルギーの低い状態から  $N_{\text{tr}}$  個を残して、高エネルギー状態を破棄する (トランケーション)。しかし、やみくもに切ると、系の持つ対称性を壊してしまうことがある。このため、エネルギーを低い順に並べて  $N_{\text{tr}}$  番目の状態と同じエネルギーを持つ状態については全て「残す」ということにする。もちろん  $N_{\text{tr}}$  が大きいほど正確なエネルギー固有値が得られるが、アンダーソン模型では 400 個程度残せば十分である。回転対称性がある場合は、全スピンで状態を同定できるので、同じ  $N_{\text{tr}}$  でも精度が上がる。

## 1.2 電子正孔対称な自由電子ハミルトニアン

ここでは (1.77) で  $f_{-1} \rightarrow 0$  とした場合の自由ハミルトニアンの性質を考える。電子正孔対称性がある場合は、

$$f_{n\sigma} \rightarrow (-1)^n f_{n\sigma}^\dagger, \quad f_{n\sigma}^\dagger \rightarrow (-1)^n f_{n\sigma} \quad (1.94)$$

の変換に対して、ハミルトニアンは不変である。(1.70)の括弧内第一項はこの対称性を破る。よって、

$$H_N^{\text{sym}} = \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \tilde{t}_n \left[ f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma} \right] \quad (1.95)$$

を考えることにする。 $\tilde{t}_n$ はわかっているので数値的に対角化すればよい。 $N$ が奇数の結果を表1.1に示す。

Energy $N = 39$	$N = 25$	$\Lambda = 2.5$
39.0625000000000	39.0625000000000	
15.6249999999154	15.6249999999154	
6.24999504337603	6.24999504337616	
2.49320633210223	2.49320633212800	
0.746855856101589	0.746855856193959	
-0.746855856101589	-0.746855856193959	
-2.49320633210223	-2.49320633212800	
-6.24999504337604	-6.24999504337616	
-15.6249999999154	-15.6249999999154	
-39.0625000000000	-39.0625000000000	

表 1.1:  $N$ :奇数の自由電子ハミルトニアンの固有値。 $N \sim 20$  で十分収束している。

対角化されたハミルトニアンを

$$H_N^{\text{sym}} = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N+1} \eta_i g_{i\sigma}^{\dagger} g_{i\sigma} \quad (1.96)$$

と書く。表 1.1 を見れば明らかなように、電子正孔対称なので正負に対称に固有値が分布している。負のエネルギーをもつ  $g_{i\sigma}$  を電子正孔変換により、

$$h_{i\sigma}^{\dagger} = i(\sigma_y)_{\sigma\sigma'} g_{i\sigma'} \quad (1.97)$$

$$h_{i\sigma} = i(\sigma_y)_{\sigma\sigma'} g_{i\sigma'}^{\dagger} \quad (1.98)$$

と変換すると、

$$H_N^{\text{sym}} = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} \eta_i (g_{i\sigma}^{\dagger} g_{i\sigma} + h_{i\sigma}^{\dagger} h_{i\sigma}) + \text{const.} \quad (1.99)$$

のようになる。エネルギー  $\eta_m$  は小さい  $m$  を除いて、 $\eta_m \sim \Lambda^{m-1}$  のようになっている。このことは  $g_i, h_i$  が (1.35) の  $a_{i0}, b_{i0}$  と同じような物であることから当然である。また、小さい  $n$  について  $f_n$  を  $g, h$  で表すと、

$$f_{0\sigma} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} \alpha_{0i} \left[ g_{i\sigma} + \bar{\sigma} h_{i\bar{\sigma}}^{\dagger} \right] \quad (1.100)$$

$$f_{1\sigma} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} \alpha_{1i} \left[ g_{i\sigma} - \bar{\sigma} h_{i\bar{\sigma}}^{\dagger} \right] \quad (1.101)$$

となる。 $f_2$ については、 $f_0$ に比例する部分と $\sim \Lambda^{-5(N-1)/4}$ に比例する部分とがあり、複雑である。また、 $f_3$ についても $f_1$ に比例する部分と $\sim \Lambda^{-7(N-1)/4}$ に比例する部分がある。 $n$ が大きくなっても同様である。数値計算により、 $\alpha_{0i}, \alpha_{1i}$ を見積もることができ、 $\Lambda$ の関数として次のように表せる(数値は $\Lambda = 2.5$ の場合)。

$$\begin{aligned} \alpha_{01} &= 0.69872, & \alpha_{11} &= 0.65178 \\ \alpha_{02} &= 0.87279, & \alpha_{12} &= 2.71789 \\ \alpha_{03} &= 1.3693, & \alpha_{13} &= 10.6892 \\ &\dots\dots & &\dots\dots \\ \alpha_{0j} &= \sqrt{\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}} \Lambda^{(j-1)/2} \end{aligned} \quad (1.102)$$

$$\alpha_{1j} = \sqrt{\frac{1-\Lambda^{-3}}{2}} \Lambda^{3(j-1)/2} \quad (1.103)$$

次に $N$ が偶数の場合を表1.2に示す。この場合はエネルギーが0の状態が一つあり、その他の状

Energy $N = 38$	$N = 24$	$\Lambda = 2.5$
61.7632355501636	61.7632355501638	
24.7052942200654	24.7052942200654	
9.88211765553068	9.88211765553068	
3.95255047713874	3.95255047714622	
1.52048320525003	1.52048320545096	
4.290484909047713E-018	2.380302193206076E-016	
-1.52048320525003	-1.52048320545096	
-3.95255047713874	-3.95255047714622	
-9.88211765553067	-9.88211765553068	
-24.7052942200654	24.7052942200654	
-61.7632355501636	-61.7632355501638	

表 1.2:  $N$ :偶数の場合の自由電子ハミルトニアン固有値。偶数の時と同様に $N \sim 20$ で十分収束している。

態は正負に対称に分布しており、 $\hat{\eta}_m \sim \Lambda^{m+1/2}$ である。 $N$ が奇数の時と同様にして、

$$H_N^{\text{sym}} \rightarrow \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N/2} \hat{\eta}_i (g_{i\sigma}^{\dagger} g_{i\sigma} + h_{i\sigma}^{\dagger} h_{i\sigma}) + \hat{\eta}_0 g_{0\sigma}^{\dagger} g_{0\sigma} + \text{const.}$$

$$f_{0\sigma} = \Lambda^{-(N-1)/4} \left\{ \sum_{i=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{0i} [g_{i\sigma} + \bar{\sigma} h_{i\bar{\sigma}}^{\dagger}] + \alpha_{00} g_{i\sigma} \right\} \quad (1.104)$$

$$f_{1\sigma} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_{i=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{1i} [g_{i\sigma} - \bar{\sigma} h_{i\bar{\sigma}}^{\dagger}] \quad (1.105)$$

$$\hat{\alpha}_{0i} = \alpha_{0i} \Lambda^{1/4} \quad (1.106)$$

$$\hat{\alpha}_{1i} = \alpha_{0i} \Lambda^{3/4} \quad (1.107)$$

と書けることが数値計算によりわかる。 $f_2, f_3, \dots$ については事情は奇数の時と同様である。以上を図示すると図 1.3 のように描ける。

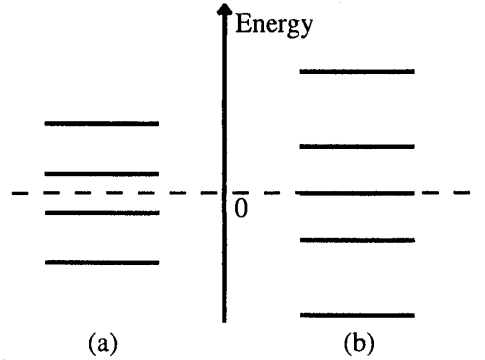


図 1.3: 電子正孔対称な自由電子ハミルトニアンエネルギー準位。(a) $N$ : 偶数。(b) $N$ : 奇数。

### 1.3 電子正孔非対称な自由電子ハミルトニアン

ここでは、自由電子ハミルトニアンとして  $K \sum_{\sigma} f_{0\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma}$  の項を付け加えたハミルトニアンを考える。この項は不純物サイトにおけるポテンシャル散乱を表している。他の  $\tilde{\epsilon}_n$  は全てゼロの場合である。つまり、伝導電子の状態密度は電子正孔対称な場合である (ここでも状態密度は一定とする。) ここでは  $N$  が奇数の場合について説明する。偶数の場合にも同じようにできる [3]。

$$H_N^{\text{asym}} = \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{\sigma} \left[ \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \tilde{t}_n \left[ f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma} \right] + K f_{0\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma} \right] \quad (1.108)$$

$$= \sum_l \eta_l a_l^{\dagger} a_l + K \sum_{l'} \alpha_{0l} \alpha_{0l'} a_l^{\dagger} a_{l'} \quad (1.109)$$

$$a_l = g_l \quad \text{for } l > 0 \quad (1.110)$$

$$a_l = \pm h_l^{\dagger} \quad \text{for } l < 0 \quad (1.111)$$

ここで (1.100)(1.102)(1.97)(1.98) を用いた。 $a_l$  は電子正孔対称性がある時の固有状態の消滅演算子である (スピンの添え字は省略する)。 $l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm(N+1)/2$  であり、 $\eta_{\pm l} \sim \pm \Lambda^{l-1}$  である。次に、(1.108) を対角化するような消滅演算子  $c_j$  を、

$$a_l \equiv \sum_j u_{lj} c_j \quad (1.112)$$

で定義すると、(1.108) は次のように書ける。

$$H_N^{\text{asym}} = \sum_{jk} \left[ \sum_l \eta_l u_{lj}^* u_{lk} + K \sum_{l'} \alpha_{0l} \alpha_{0l'} u_{lj}^* u_{l'k} \right] c_j^{\dagger} c_k \quad (1.113)$$

$$\equiv \sum_j \eta_j^a c_j^{\dagger} c_j \quad (1.114)$$

よって、

$$\delta_{jk} \eta_j^a = \sum_l \eta_l u_{lj}^* u_{lk} + K \sum_{l'} \alpha_{0l} \alpha_{0l'} u_{lj}^* u_{l'k} \quad (1.115)$$



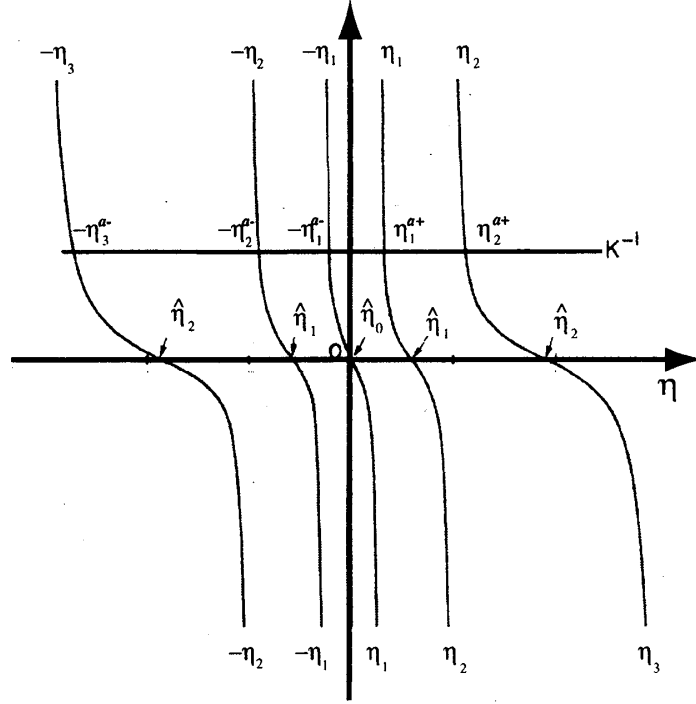


図 1.4: 電子正孔非対称な場合のエネルギー固有値の求め方。図の交点が  $\eta_j^{a\pm}$  の解になる。

という関係が成り立つ。(1.115) の両辺に  $\sum_m \alpha_{0m} (\eta_m - \eta_k^a)^{-1} \sum_j u_{mj}$  を作用させて整理すると次の式が導かれる。

$$K^{-1} = \sum_m \frac{\alpha_{0m}^2}{\eta_k^a - \eta_m} = 2\eta_k^a \sum_{m=1}^{(N+1)/2} \frac{\alpha_{0m}^2}{\eta_k^{a2} - \eta_m^2} \quad (1.116)$$

$$u_{mk} = \frac{K \alpha_{0m}}{\eta_k^a - \eta_m} B_k \quad (1.117)$$

$$B_k = \sum_l \alpha_{0l} u_{lk} = K^{-1} \left[ \sum_m \frac{\alpha_{0m}^2}{(\eta_k^a - \eta_m)^2} \right]^{-1/2} \quad (1.118)$$

また、 $f_0$  は (1.100) より、

$$f_0 = \Lambda^{(N-1)/4} \sum_l \alpha_{0l} a_l = \Lambda^{(N-1)/4} \sum_l B_l c_l \quad (1.119)$$

以前と同様に、 $c_l$  を電子と正孔の演算子  $g_l, h_l$  で書き直すと、

$$f_{0\sigma} = \Lambda^{(N-1)/4} \sum_i (\alpha_{0i}^+ g_{i\sigma} + \alpha_{0i}^- \bar{\sigma} h_{i\bar{\sigma}}^\dagger) \quad (1.120)$$

$$\alpha_{0i}^\pm = K^{-1} \left[ \sum_{l=1}^{(N+1)/2} \frac{\alpha_{0l}^2}{(\eta_l - \eta_i^{a\pm})^2} + \sum_{l=1}^{(N+1)/2} \frac{\alpha_{0l}^2}{(\eta_l + \eta_i^{a\pm})^2} \right]^{-1/2} \quad (1.121)$$

と表される。 $\eta_i^{a\pm}$  はそれぞれ  $g_i, h_i$  の 1 粒子エネルギーである。 $\alpha_{0i}^\pm, \eta_i^{a\pm}$  の  $i$  が大きい時の漸近形が知られていて [3]、

$$\alpha_{0i}^\pm = \alpha_0(K) \sqrt{\eta_i^{a\pm}} \quad (1.122)$$

$$\alpha_0(K) = \alpha_0 \left[ 1 + \left( \frac{\pi \alpha_0^2 K}{\ln \Lambda} \right)^2 \right]^{-1/2} \equiv \alpha_0 \sqrt{\phi(K)} \quad (1.123)$$

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2}} \quad (1.124)$$

$$\eta_i^{a\pm} = \Lambda^{(j-1)\pm\gamma}, \quad K^{-1} = \frac{\pi \alpha_0^2}{\ln \Lambda} \cot(\pi\gamma) \quad (1.125)$$

である。

最後に (1.108) において直接  $f$  から  $c$  に変換することを考える。

$$f_n = \sum_j \mathcal{W}_{nj} c_j, \quad c_j = \sum_n \mathcal{W}_{nj} f_n \quad (1.126)$$

また、行列表示のシュレーディンガー方程式の  $f_0$  に関する行はスピンの添え字をつけて、次のように書ける。

$$\begin{aligned} A_{1\sigma} \equiv K f_{0\sigma} + \tilde{t}_0 f_{1\sigma} &= \Lambda^{-(N-1)/2} \sum_j \eta_j^a \mathcal{W}_{0j} c_{j\sigma} \\ &= \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_j \eta_j^a B_j c_{j\sigma} \\ &= \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{0j}^+ \eta_j^{a+} g_{j\sigma} - \alpha_{0j}^- \eta_j^{a-} \bar{\sigma} h_{j\bar{\sigma}}^\dagger) \end{aligned} \quad (1.127)$$

2行目で (1.119) を用いた。(1.120) と (1.127) の表式は後に有効ハミルトニアンを求めるときに用いる。

#### 1.4 強結合固定点でのエネルギースペクトル

ここでは実際にアンダーソン模型を NRG を用いて数値計算を行った結果を紹介する。ここでの物理描像が  $f^2$  模型の場合の基礎となる。

電子正孔対称性がある場合：

図 1.5 は  $N$  が奇数の場合のエネルギー固有値の  $N$  依存性である。表を見ればわかるように収束した後の値は  $N$  が偶数の場合の自由電子ハミルトニアン固有値に等しい(ここでは全スピン  $S$  で状態を区別している)。図 1.7 は  $N$  が偶数の場合のエネルギー固有値の  $N$  依存性である。表を

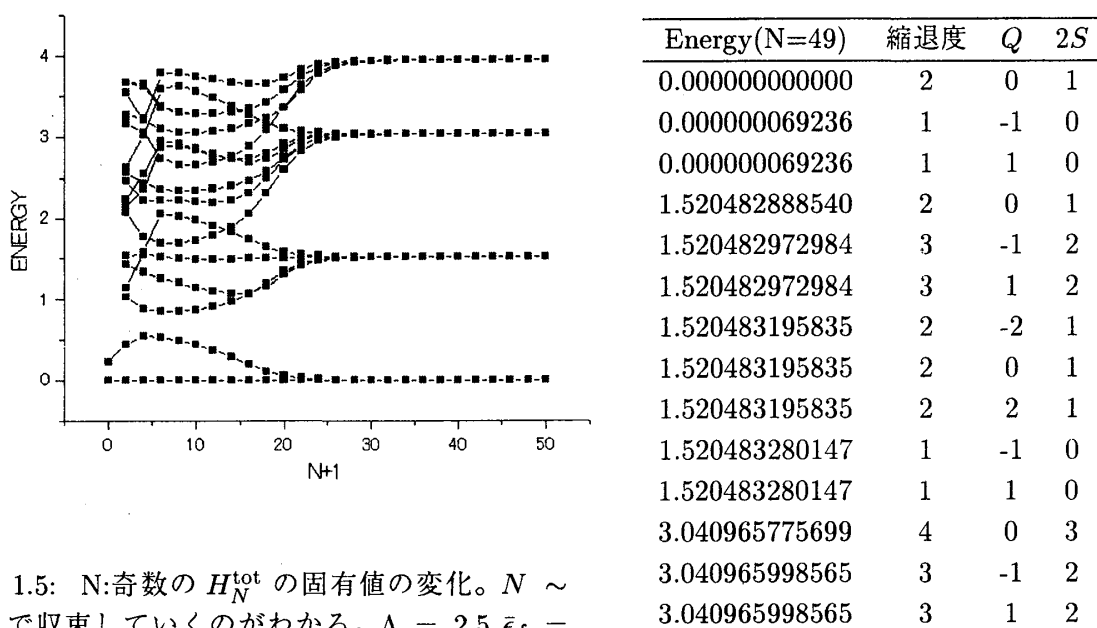


図 1.5:  $N$ :奇数の  $H_N^{\text{tot}}$  の固有値の変化。  $N \sim 20$  で収束していくのがわかる。  $\Lambda = 2.5, \bar{\epsilon}_f = -0.4D, \bar{U} = 0.8, v = 0.2$  である。

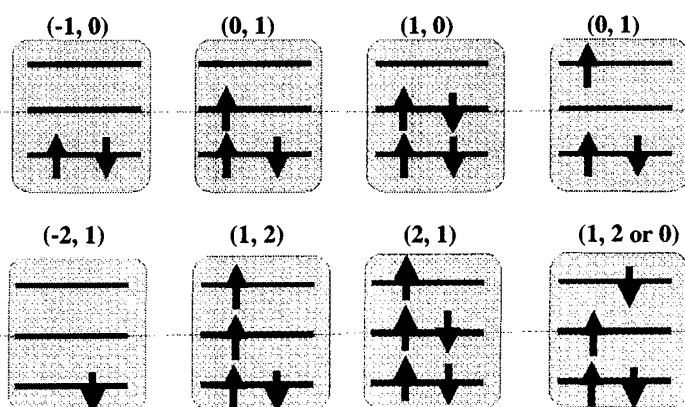
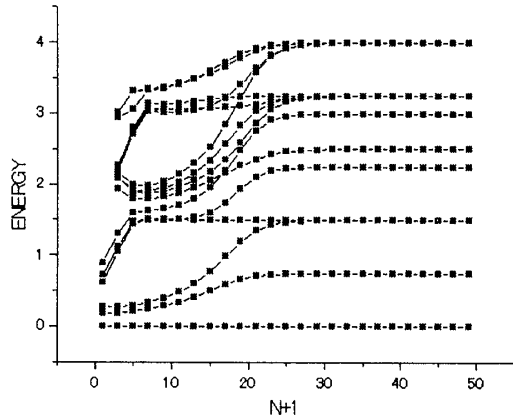


図 1.6:  $N$ :奇数の時のエネルギー準位を再現するような自由電子準位への電子の詰め方の一部。中心の準位はフェルミ面上の 0 エネルギー準位である。絵の下方の準位は全て詰まっている。括弧は  $(Q, 2S)$

見ればわかるように収束した後の値は  $N$  が奇数の場合の自由電子ハミルトニアン固有値に等しい。これらの結果は、図 1.9 の示すように、 $f_0$  と  $f_{-1}$  が一重項を形成し、残った伝導電子は自由電子として振舞っているという描像で説明できる。このため、偶奇が反転する。



Energy(N=50)	縮退度	$Q$	$2S$
0.000000000000	1	0	0
0.746855747727	2	-1	1
0.746855747727	2	1	1
1.493711278870	3	0	2
1.493711712158	1	-2	0
1.493711712158	1	0	0
1.493711712158	1	2	0
2.240567243364	2	-1	1
2.240567243364	2	1	1

図 1.7:  $N$ :偶数の  $H_N^{\text{tot}}$  の固有値の変化。  $N \sim 20$  で収束しているのがわかる。  $\Lambda = 2.5, \bar{\epsilon}_f = -0.4, \bar{U} = 0.8, v = 0.2$  である。

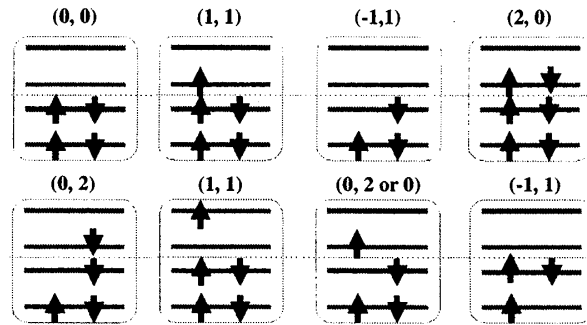


図 1.8:  $N$ :偶数の場合のエネルギー準位を再現するような自由電子準位への電子の詰め方の一部。中心の線がフェルミ準位を表す。絵の下方の準位は全て詰まっている。括弧は  $(Q, 2S)$

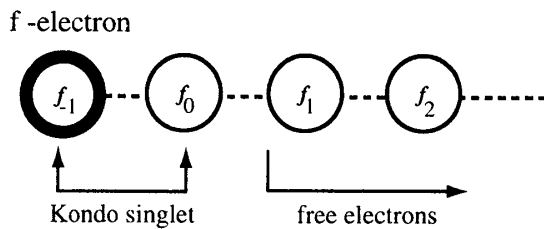


図 1.9: 図 1.5、図 1.7 の物理的描像。伝導電子で最も局在的な  $f_0$  軌道が  $f$  電子と近藤一重項を形成する。

### 電子正孔対称性がない場合：

電子正孔対称性がない場合も低温の固定点は強結合固定点であるが、対称な場合と異なり、荷電揺動固定点が存在する [3]。ここでは詳細には立ち入らず、強結合固定点に話を絞ることにする。非対称な場合もポテンシャル散乱の部分以外は対称な時と同じであるので、 $N$ :偶数の場合だけを以下に示す。図 1.10 は  $N$  が偶数の場合のエネルギー固有値の  $N$  依存性である。収束した後の値は  $N$  が奇数の場合のポテンシャル散乱がある自由電子ハミルトニアン (1.108) の固有値に等しい。

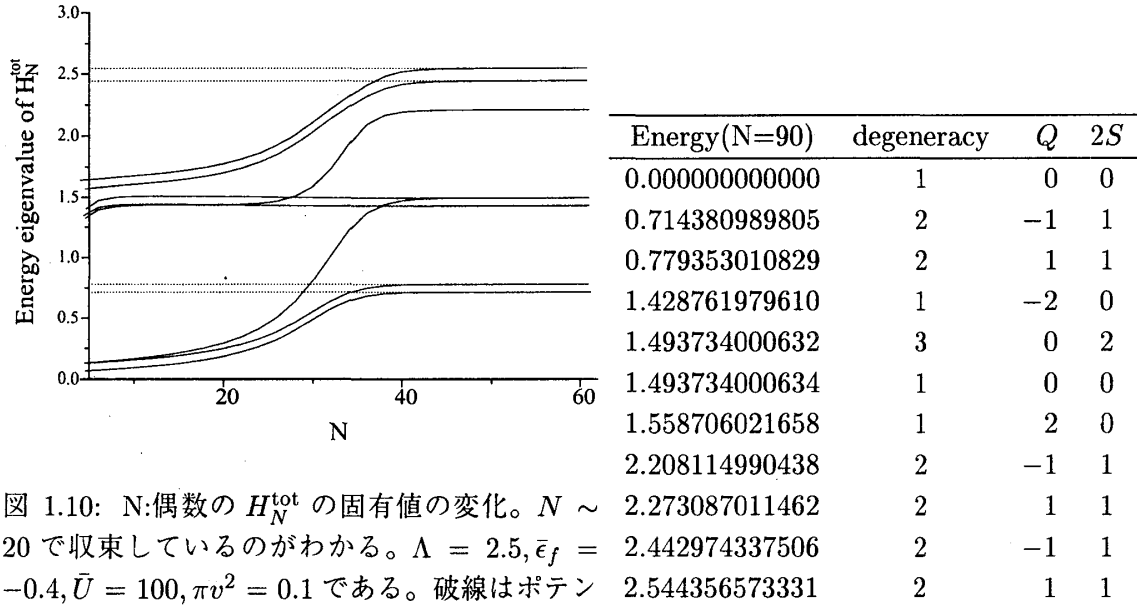


図 1.10:  $N$ :偶数の  $H_N^{\text{tot}}$  の固有値の変化。  $N \sim 20$  で収束しているのがわかる。  $\Lambda = 2.5, \bar{\epsilon}_f = -0.4, \bar{U} = 100, \pi v^2 = 0.1$  である。破線はポテンシャル散乱  $K = 0.0667$  をもつ自由電子の一粒子エネルギースペクトルである。

## 1.5 強結合固定点の周りでの有効ハミルトニアン

前節では強結合固定点でのエネルギー固有値は、偶奇が入れ替わった自由電子ハミルトニアンで記述されることを見た。しかし、実際には  $N \rightarrow \infty$  でのみ固定点に行き着く。よって、有限の  $N$  では何らかの「ズレ」があるはずである。以後は全て  $N$  が偶数の場合を考える (奇数の時も議論は全く同様にできる)。

まず強結合固定点のハミルトニアンを  $H^*$  で表す。十分に大きい有限の  $N$  では、

$$H_N^{\text{tot}} = H^* + \delta H_N \quad (1.128)$$

$$\delta H_N \equiv \sum_i w_i \Lambda^{(N-1)/2} \hat{O}_i \quad (1.129)$$

と書けるはずである。  $\Lambda^{(N-1)/2}$  は繰り込み変換を行うたびに  $\Lambda$  をかけていく寄与を抜き出すために、  $\hat{O}_i$  からくりだしている。  $\delta H_N$  は未知であるが、これを次のように推量する。偶奇によってエネルギー固有値が振動するので、繰り込み変換  $\mathcal{T} \equiv \mathcal{R}^2$  を定義すると ( $\mathcal{T}H^* = H^*$ )、

$$\delta H_{N+2} = \mathcal{T} \delta H_N = \mathcal{T} \sum_i w_i \Lambda^{(N-1)/2} \hat{O}_i = \sum_i w_i \mathcal{T} \Lambda^{(N-1)/2} \hat{O}_i$$

$$= \sum_i w_i \Lambda^{(N-1)/2} (\Lambda \lambda_i) \hat{O}_i \quad (1.130)$$

と変換を受けるはずである。ここで  $\hat{O}_i$  の固有値を  $\lambda_i$  とした。  $\Lambda^{(N-1)/2} \rightarrow \Lambda^{(N+1)/2}$  と変換する寄与も存在する。有効ハミルトニアン of 各項に対する、繰り込み群の固有値は  $\Lambda \lambda_i$  であるので、  $\Lambda \lambda_i < 1$  の項のみ存在する時のみ強結合固定点は安定であるといえる。もしそうでなければ、その項は「relevant」な摂動となって、強結合固定点は安定でなくなる。まず、  $\hat{O}_i$  は元の  $f_{-1}, f_0, f_1, \dots$  で構成できると仮定する。さらに、固定点の持つ対称性を破らないような項でなければならない。このようにして、以下の候補が挙げられる (表 1.3)。スピンの添え字を  $\mu, \nu$  で表し、繰返し現れる添え字については和が取られていることとする。  $\hat{O}_4$  については、強結合固定点では、f 電子の

$\hat{O}_i$	表式	固有値 $\lambda_i$	RG としての固有値
$\hat{O}_1$	$f_{0\mu} A_{1\mu}^\dagger + A_{1\mu} f_{0\mu}^\dagger$	$\Lambda^{-2}$	$\Lambda^{-1}$
$\hat{O}_2$	$(f_{0\mu}^\dagger f_{0\mu} - 1)^2$	$\Lambda^{-2}$	$\Lambda^{-1}$
$\hat{O}_3$	$(f_{0\mu}^\dagger f_{0\mu} - 1)$	$\Lambda^{-1}$	1
$\hat{O}_4$	$(f_{-1\mu}^\dagger f_{-1\mu} - 1)(f_{0\nu}^\dagger f_{0\nu} - 1)$	$\Lambda^{-1}$	1
$\hat{O}_5$	$f_{-1\mu}^\dagger (\vec{\sigma})_{\mu\mu'} f_{-1\mu'} \cdot f_{0\nu}^\dagger (\vec{\sigma})_{\nu\nu'} f_{0\nu'}$	$\Lambda^{-1}$	1

表 1.3: 有効ハミルトニアンの候補

電荷の揺らぎは抑えられているので  $\hat{O}_3$  に含ませることができる。また、  $\hat{O}_5$  については、f 電子の「スピン」は伝導電子と一重項を作っており「凍っている」のでただの定数とみなすことができる。よって、  $T$  によって定数項を差し引いているのでこの項は考えなくても良い。また、  $f_2, f_3$  等で作られるものはさらに小さい固有値しか持ち得ないので  $N$  が十分に大きければ  $\hat{O}_1, \hat{O}_2$  に比べて無視できる [1]。したがって、残るのは  $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \hat{O}_3$  だけである (このように考えると、  $\Lambda \lambda_i > 1$  となるような項は出てこないことから強結合固定点は安定であることがわかる)。しかし、  $\hat{O}_3$  の固有値  $\Lambda \lambda_3 = 1$  というのは問題である。 [3] によれば、  $\hat{O}_3$  の項は「marginal」で線形化された繰り込み変換では変化しないが、これは以前見たポテンシャル散乱の項なので、  $H^*$  の定義に含ませることができる。以上により、有効ハミルトニアンは  $\hat{O}_1, \hat{O}_2$  で構成される。このように推量された有効ハミルトニアンが妥当かどうかは、実際に得られたエネルギースペクトルと比べることで評価できる。その結果は後で示すが、極めて良い精度でエネルギースペクトルを再現することが可能である [1]。

有効ハミルトニアンの妥当性を評価するために  $\hat{O}_1, \hat{O}_2$  を  $g, h$  を使い、  $N$  積で表した表式を用いる (付録 A)。

$$\begin{aligned}
 \hat{O}_1 &= \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ij} \left[ (\alpha_i^+ \beta_j^+ + \alpha_j^+ \beta_i^+) g_{i\mu}^\dagger g_{j\mu} + (\alpha_i^- \beta_j^- + \alpha_j^- \beta_i^-) h_{i\mu}^\dagger h_{j\mu} \right. \\
 &\quad \left. + \bar{\mu} (\alpha_i^+ \beta_j^- - \alpha_j^- \beta_i^+) (g_{i\mu} h_{j\bar{\mu}} - g_{i\bar{\mu}}^\dagger h_{j\mu}^\dagger) \right] + \text{const.} \quad (1.131) \\
 \hat{O}_2 &= \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ijkl} \left[ -\alpha_i^+ \alpha_j^+ \alpha_k^+ \alpha_l^+ g_{i\mu}^\dagger g_{k\nu}^\dagger g_{j\mu} g_{l\nu} - \alpha_i^- \alpha_j^- \alpha_k^- \alpha_l^- h_{i\mu}^\dagger h_{k\nu}^\dagger h_{j\mu} h_{l\nu} \right. \\
 &\quad - \bar{\mu} \bar{\nu} \alpha_i^+ \alpha_j^- \alpha_k^+ \alpha_l^- (g_{i\mu}^\dagger g_{k\nu}^\dagger h_{j\bar{\mu}}^\dagger h_{l\bar{\nu}}^\dagger + g_{i\mu} g_{k\nu} h_{j\bar{\mu}} h_{l\bar{\nu}}) \\
 &\quad + 2\alpha_i^+ \alpha_j^+ \alpha_k^- \alpha_l^- (g_{i\mu}^\dagger h_{k\nu}^\dagger g_{j\mu} h_{l\nu} - \bar{\mu} \bar{\nu} g_{i\mu}^\dagger h_{k\bar{\mu}}^\dagger g_{j\nu} h_{l\bar{\nu}}) \\
 &\quad + 2\bar{\nu} \alpha_i^+ \alpha_j^+ \alpha_k^- \alpha_l^- g_{i\mu}^\dagger g_{k\nu}^\dagger g_{j\mu} h_{l\bar{\nu}} - 2\bar{\nu} \alpha_i^- \alpha_j^- \alpha_k^- \alpha_l^- h_{i\mu}^\dagger g_{l\nu} h_{j\mu} h_{k\bar{\nu}} \\
 &\quad \left. - 2\bar{\mu} \alpha_i^+ \alpha_j^- \alpha_k^- \alpha_l^- g_{i\mu}^\dagger h_{j\bar{\mu}}^\dagger h_{k\nu}^\dagger h_{l\nu} + 2\bar{\nu} \mu \alpha_i^+ \alpha_j^+ \alpha_k^- \alpha_l^- g_{i\mu}^\dagger g_{k\nu}^\dagger h_{l\bar{\nu}}^\dagger h_{j\mu} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\Lambda^{-(N-1)}C_2 \sum_{ij} \left[ \alpha_i^+ \alpha_j^+ g_{i\mu}^\dagger g_{j\mu} - \alpha_i^- \alpha_j^- h_{i\mu}^\dagger h_{j\mu} + \bar{\mu} \alpha_i^- \alpha_j^+ h_{i\bar{\mu}} g_{j\mu} - \bar{\mu} \alpha_i^+ \alpha_j^- g_{i\mu}^\dagger h_{j\bar{\mu}}^\dagger \right] \\
& +\text{const.}
\end{aligned} \tag{1.132}$$

$$\alpha_i^\pm \equiv \alpha_{oi}^\pm \tag{1.133}$$

$$\beta_i^\pm \equiv \alpha_i^\pm \eta_i^{a\pm} \tag{1.134}$$

$$C_2 = -\Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} [\alpha_i^{+2} - \alpha_i^{-2}] + 2 \sinh(\gamma \ln \Lambda) \frac{1}{1 - \Lambda^{-1}} \alpha_0^2(K) \tag{1.135}$$

ここでも const. の部分は  $\mathcal{T}$  で落とされるので無視してよい。(1.132) の  $C_2$  に比例する項は、[3] では見落とされていた項である。この項がないと、電子正孔対称性がない場合のエネルギースペクトルを再現できない。(1.131)(1.132) を用いて  $\delta H_N$  を書くと、

$$\delta H_N = \Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^2 w_i [\Lambda^{(N-1)} \hat{O}_i] \tag{1.136}$$

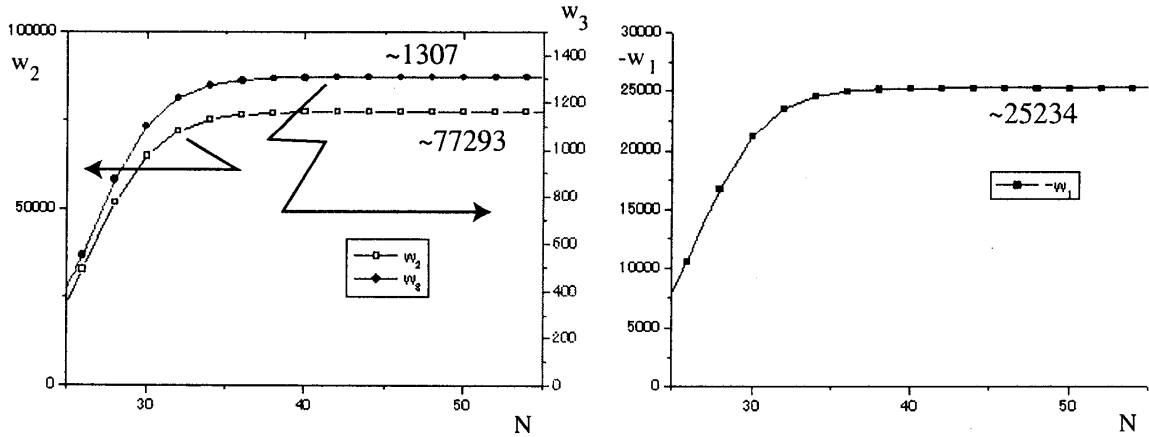
となることからわかるように  $\delta H_N \sim \Lambda^{-(N-1)/2}$  である。このため、 $N$  が大きくなるにつれ急激に小さくなるので  $H_N$  のエネルギー固有値を再現するには、摂動論の 1 次までとれば十分である。つまり  $H_N$  に関して、ある量子数で指定される状態  $i$  とすると、そのエネルギー  $E_N^i$  は

$$E_N^i \sim E_i^* + \langle i | \delta H_N | i \rangle \tag{1.137}$$

と、 $\delta H_N$  については対角項だけを取ってこればよい。ここで、 $E_i^*$  は強結合固定点でのエネルギーである。

RG のパラメータ空間は強結合固定点近傍で  $w_1, w_2$  で張られる 2 次元空間である。強結合固定点は  $\mathbf{H}^* = (0, 0)$  で表される。パラメータ  $w_1, w_2$  は未知なので、2 つの状態を使ってこれらの値を決定する (表 1.4)。その値を用いて他の状態のエネルギーを計算し、どの程度の精度でこの有効ハミルトニアンが正しいかを確認することができる。ここでは、 $w_3 \equiv C_2 w_2$  とおいて  $w_3$  もパラメータと思い、エネルギーを求める。そのようにして決定された  $w_3$  と (1.135) から計算される値を比較することで (1.132) の正しさを評価できる。固定点のエネルギースペクトル  $E^*$  は  $N \rightarrow \infty$  でのみ得られる。実際の計算には十分に大きい  $N$  を  $E^*$  の代用として用いた。表 1.4 の状態 "1" と "4" を使って  $\tilde{w}_1 \equiv \Lambda^{-(N-1)/2} w_1, \tilde{w}_3 \equiv \Lambda^{-(N-1)/2} w_3$  を決定する。その値と、状態 "7" を用いて  $\tilde{w}_2 \equiv \Lambda^{-(N-1)/2} w_2$  を決定した。実際に NRG で得られたエネルギー固有値との比較は表 1.5 のようである。一致の精度は 1% 以下である。また  $C_2$  に関する一致も 1% 以下であり、(1.132) が正しいことが数値的に証明できた。同じパラメータにおいて、 $N$  を変化させたときの  $w_i$  の変化を図 1.11 に示す。固定点近傍では  $w_i$  が収束して一定になっていることがわかる。これにより、仮定した有効ハミルトニアンの正しさが証明できる。他のパラメータを用いても、結果の精度は変わらずに良いことも確認した。

指標	$H^*$	$(Q, 2S)$	$\delta H_N$
1	$\eta_1^+$	(1, 1)	$2\alpha_1^+\beta_1^+\tilde{w}_1 + \alpha_1^{+2}\tilde{w}_3$
2	$2\eta_1^+ + \eta_1^-$	(1, 1)	$2(2\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_1^-\beta_1^-)\tilde{w}_1 + (2\alpha_1^{+2} - \alpha_1^{-2})\tilde{w}_3 + 2(\alpha_1^{+4} - \alpha_1^{+2}\alpha_1^{-2})\tilde{w}_2$
3	$\eta_2^+$	(1, 1)	$2\alpha_2^+\beta_2^+\tilde{w}_1 + \alpha_2^{+2}\tilde{w}_3 + 2\alpha_1^{+2}\alpha_1^-\alpha_2^+\tilde{w}_2$
4	$\eta_1^-$	(-1, 1)	$2\alpha_1^-\beta_1^-\tilde{w}_1 - \alpha_1^{-2}\tilde{w}_3$
5	$2\eta_1^- + \eta_1^+$	(-1, 1)	$2(2\alpha_1^-\beta_1^- + \alpha_1^+\beta_1^+)\tilde{w}_1 - (2\alpha_1^{-2} - \alpha_1^{+2})\tilde{w}_3 + 2(\alpha_1^{-4} - \alpha_1^{+2}\alpha_1^{-2})\tilde{w}_2$
6	$\eta_2^-$	(-1, 1)	$2\alpha_2^+\beta_2^+\tilde{w}_1 - \alpha_2^{-2}\tilde{w}_3 - 2\alpha_1^{-2}\alpha_1^+\alpha_2^-\tilde{w}_2$
7	$2\eta_1^+$	(2, 0)	$4\alpha_1^+\beta_1^+\tilde{w}_1 + 2\alpha_1^{+2}\tilde{w}_3 + 2\alpha_1^{+4}\tilde{w}_2$
8	$\eta_1^+ + \eta_2^+$	(2, 0)	$2(\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_2^+\beta_2^+)\tilde{w}_1 + (\alpha_1^{+2} + \alpha_2^{+2})\tilde{w}_3 + 4\alpha_1^{+2}\alpha_2^{+2}\tilde{w}_2$
9	$2\eta_1^-$	(-2, 0)	$4\alpha_1^-\beta_1^-\tilde{w}_1 - 2\alpha_1^{-2}\tilde{w}_3 + 2\alpha_1^{-4}\tilde{w}_2$
10	$\eta_1^- + \eta_2^-$	(-2, 0)	$2(\alpha_1^-\beta_1^- + \alpha_2^-\beta_2^-)\tilde{w}_1 - (\alpha_1^{-2} + \alpha_2^{-2})\tilde{w}_3 + 4\alpha_1^{-2}\alpha_2^{-2}\tilde{w}_2$
11	$\eta_1^+ + \eta_1^-$	(0, 0)	$2(\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_1^-\beta_1^-)\tilde{w}_1 + (\alpha_1^{+2} - \alpha_1^{-2})\tilde{w}_3 + 2\alpha_1^{+2}\alpha_1^{-2}\tilde{w}_2$
12	$2\eta_1^+ + 2\eta_1^-$	(0, 0)	$4(\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_1^-\beta_1^-)\tilde{w}_1 + 2(\alpha_1^{+2} - \alpha_1^{-2})\tilde{w}_3 + 2(\alpha_1^{+2} - \alpha_1^{-2})^2\tilde{w}_2$
13	$\eta_1^+ + \eta_2^-$	(0, 0)	$2(\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_2^-\beta_2^-)\tilde{w}_1 + (\alpha_1^{+2} - \alpha_2^{-2})\tilde{w}_3 + 2\alpha_1^{+2}\alpha_2^{-2}\tilde{w}_2$
14	$\eta_2^+ + \eta_1^-$	(0, 0)	$2(\alpha_2^+\beta_2^+ + \alpha_1^-\beta_1^-)\tilde{w}_1 + (\alpha_2^{+2} - \alpha_1^{-2})\tilde{w}_3 + 2\alpha_2^{+2}\alpha_1^{-2}\tilde{w}_2$
15	$\eta_1^+ + \eta_1^-$	(0, 2)	$2(\alpha_1^+\beta_1^+ + \alpha_1^-\beta_1^-)\tilde{w}_1 + (\alpha_1^{+2} - \alpha_1^{-2})\tilde{w}_3 - 2\alpha_1^{+2}\alpha_1^{-2}\tilde{w}_2$
			$\tilde{w}_i \equiv \Lambda^{-(N-1)/2}w_i, w_3 \equiv C_2w_2$

 表 1.4: 各状態の  $\delta H_N$  の期待値。

 図 1.11: 表 1.5 と同じパラメータでの  $w_1, w_2, w_3$  の  $N$  依存性。  $N \sim 30$  で値が収束してくる。



$N = 50$			
指標	$H_N^{\text{tot}} - H^*$ (数値計算)	$\delta H_N$ (一次摂動)	%
1	-0.51649E-05		input
2	-0.15485E-04	-0.15484E-04	99.99
3	-0.27442E-04	-0.27443E-04	100.00
4	-0.51654E-05		input
5	-0.15507E-04	-0.15507E-04	99.99
6	-0.26379E-04	-0.26380E-04	100.00
7	-0.54710E-08		input
8	0.53587E-07	0.53630E-07	100.08
9	-0.28741E-07	-0.28741E-07	100.00
10	0.16701E-06	0.16705E-06	100.02
11	-0.17112E-07	-0.17112E-07	100.00
12	-0.20663E-04	-0.20661E-04	99.98
13	-0.15679E-04	-0.23705E-04	151.18
14	-0.16285E-04	0.28389E+00	-17432
15	-0.20644E-04	-0.20644E-04	100.00
非対角項を含めた対角化			
13	-0.15679E-04	-0.15681E-04	100.01
14	-0.16285E-04	-0.16285E-04	100.00
$\tilde{w}_1 = -25234 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{w}_2 = 77293 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{w}_3 = 1307.0 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$C_2 = 0.16932\text{E-01}$			
$C_2 w_2 / w_3 = 0.99867$			

表 1.5: 有効ハミルトニアン (1.136) の妥当性。状態”13”, ”14”については非対角項が対角項に比べて無視できないので、縮退のある時の摂動論を用いた。パラメータは  $\bar{\epsilon}_f = -0.4$ ,  $\bar{U} = 2.0$ ,  $\pi v^2 = 0.2$ ,  $\Lambda = 2.5$ 。状態は 1000 個を残して計算を行った。

## 1.6 物理量の表式

有効ハミルトニアン  $\delta H_N$  を用いて、低温での熱力学量を計算することができる [1, 3]。ここでも、エネルギー固有値の時と同様に摂動論の一次で良い。(1.78) より  $H_N^{\text{tot}}$  の形で分配関数  $Z$  は、

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp [\beta \bar{H}] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \exp [\bar{\beta} H_N^{\text{tot}}] \\ &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N \end{aligned} \quad (1.138)$$

$$\bar{\beta} \equiv \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-(N-1)/2} \frac{1}{T} \quad (1.139)$$

とかける。一次の摂動論では  $Z_N$  は次のように近似される。

$$Z_N \sim \text{Tr} e^{-\bar{\beta} H^*} - \bar{\beta} \text{Tr} [\delta H_N e^{-\bar{\beta} H^*}] \quad (1.140)$$

よって、ここでもやるべきことは、 $\delta H_N$  の対角項を計算することに帰着される。ここでは低温でのいくつかの結果をあげておく。

比熱  $C$

$$C/T = C^0/T - \frac{4\pi^2}{3A_\Lambda} \frac{w_1}{2} \phi(K) \quad (1.141)$$

ここで  $C_0$  は自由電子の比熱である。

スピン感受率  $\chi_s$

$$\chi_s = \chi_s^0 + \left\{ -\frac{w_1}{2A_\Lambda} \phi(K) + w_2 \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{8A_\Lambda^2} \phi^2(K) \right\} \quad (1.142)$$

ここで、 $\chi_s^0$  は自由電子のスピン感受率であり、 $g\mu_B = 1$  とした。

電荷感受率  $\chi_c$

$$\chi_c = \chi_c^0 + \left\{ -\frac{w_1}{2A_\Lambda} \phi(K) - w_2 \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{8A_\Lambda^2} \phi^2(K) \right\} \quad (1.143)$$

ここで、 $\chi^0$  は自由電子のスピン感受率である。

ウィルソン比  $R$

$$R = \frac{4\pi^2}{3} \frac{T(\chi - \chi^0)}{C - C^0} = 1 - \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4A_\Lambda} \frac{w_2}{w_1} \phi(K) \quad (1.144)$$

また、スピン感受率と電荷感受率の不純物による寄与  $\delta\chi_{s(c)} \equiv \chi_{s(c)} - \chi_{s(c)}^0$  と表すとウィルソン比は

$$R = \frac{2\delta\chi_s}{\delta\chi_s + \delta\chi_c} \quad (1.145)$$

と書くことができる。繰り返し現れている  $A_\Lambda$  は、

$$A_\Lambda = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-1}} \frac{\ln \Lambda}{2} \quad (1.146)$$

である。(1.145) から、f 電子の電荷の揺らぎが抑えられた領域では  $R = 2$  となることがわかる (表 1.6)。この時には  $w_1$  と  $w_2$  は独立ではなく ( $w_1 \sim w_2$ )、系の低温での振る舞いは一つのパラメータ

$$w_1 \sim z^{-1} \sim \frac{1}{T_K} \quad (1.147)$$

で支配される (ユニバーサリティ)[8]。ここで、 $z$  は繰り込み因子である。このことは次のように理解される。伝導電子が運動エネルギーを稼ぐためには  $f_0$  サイトに二つ目の逆向きスピンをもつ伝導電子が飛び込んで来なくてはならない (もしくは、 $f_0$  サイトから  $f_1$  サイトへ)。しかしそうすると、近藤一重項を壊してしまうので  $\sim T_K$  程度エネルギーが上がってしまう。この効果が  $w_2$  であり、 $w_1$  は  $w_2$  と  $\chi_c \sim 0$  で  $w_1 \sim w_2$  と、関係付けられている。

$\bar{U}$	$v$	$K$	$\chi_s$	$R$
100.0	0.18	6.664E-2	261563	2.0044
10.0	0.18	6.450E-2	167558	2.0040
1.0	0.18	2.505E-2	2085.34	2.0006
0.42	0.18	-0.7813	5.8854	2.0497
0.7	0.18	-2.838E-2	262.320	2.0003
1.0	0.40	0.1028	1.53300	1.8889

表 1.6: 種々のパラメータでのウィルソン比。電荷の揺らぎが大きいパラメータでは  $R$  が 2 からずれる。全て  $\bar{\epsilon}_f = -0.4$  の結果である。

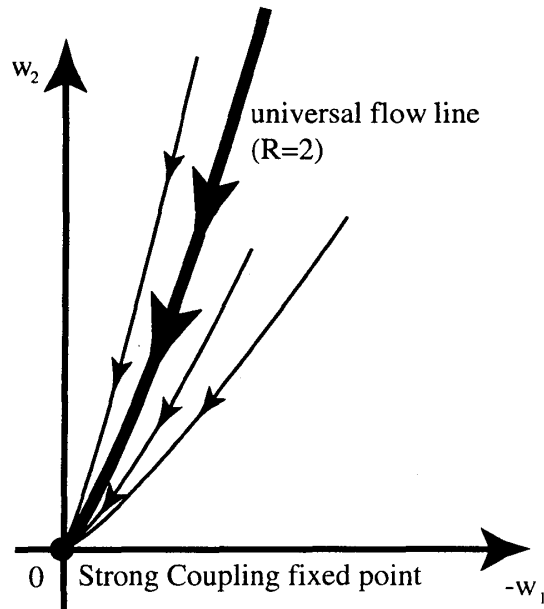


図 1.12: 強結合固定点のまわりでの RG の流れの概念図。ユニバーサリティが成立しているのはウィルソン比  $R \sim 2$  の線である (物理量は  $T_K$  でスケールされる)。

## 第2章 $f^2$ 系における定式化

この章では本研究の主題である、 $f^2$  の場合のハミルトニアンを書き下し、NRG を用いて解析を行う準備をする。本研究では  $\text{UPt}_3$  を主に念頭に置く。

### 2.1 実験的背景

これまで、 $f^2$  配置の重い電子系として  $\text{UBe}_{13}$ ,  $\text{UPt}_3$ ,  $\text{URu}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{UPd}_2\text{Al}_3$  等が盛んに研究されてきた。これらの物質は異方的超伝導、非フェルミ液体、超伝導と磁気秩序の共存、等から注目を集めているものである。

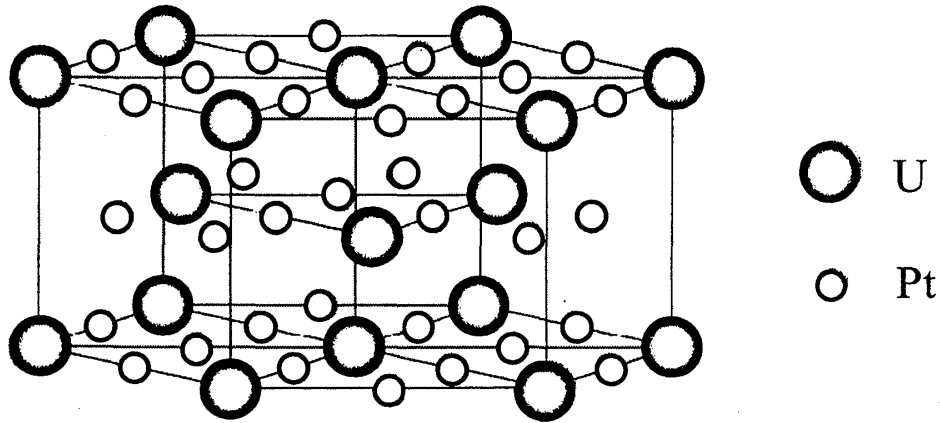


図 2.1:  $\text{UPt}_3$  の結晶構造。軸のラベルについては図 2.4(d) を参照。

例として  $\text{UPt}_3$  は図 2.1 のような構造をしており、電子比熱係数  $\gamma \sim 430 \text{ mJ/K}^2 \cdot \text{mol}$ 、 $T_c \sim 0.5 \text{ K}$  の非従来型の重い電子系超伝導体である [18]。図 2.3 は各結晶軸方向に磁場を印加した時の Pt のナイトシフトである [21]。高磁場側では、どの方向においても超伝導転移に伴ってナイトシフトは減少しない。このことは、 $\text{UPt}_3$  が奇パリティ超伝導であることを示唆している。低磁場においては  $b$  軸と  $c$  軸方向でナイトシフトの減少が観測されている。このことは定性的には  $d$  ベクトルのピン止めとして理解されている。しかしこのナイトシフトの減少量は、 $\gamma$  のように増強されていない。 $\text{UPt}_3$  は非常に良いフェルミ液体から超伝導に転移すると考えられているが、この矛盾は通常のフェルミ液体では説明がつかない。また、 $T_N \sim 5 \text{ K}$  の弱い反強磁性を中性子散乱で報告されているが [19]、NMR や他の実験では観測されていない。これとともに強磁性的な揺らぎも中性子散乱により観測されており、超伝導とこれらのスピン揺らぎが関係している可能性も存在する。ナイトシフトに関する矛盾にたいしての理論的な提案としては [27] がある。

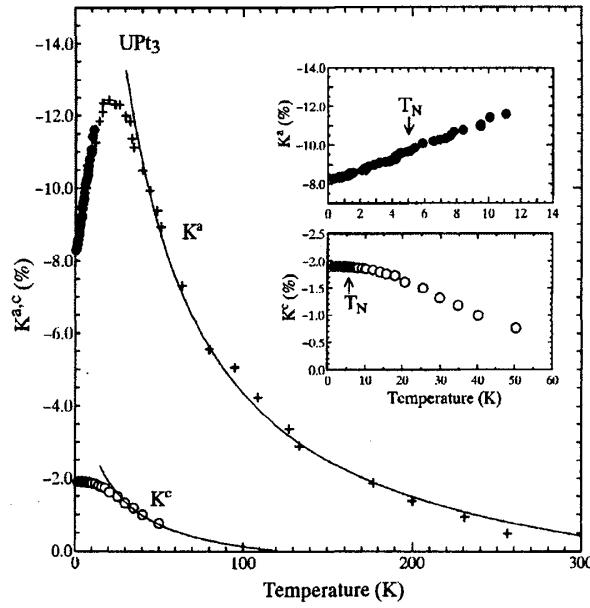


図 2.2:  $\text{UPt}_3$  のナイトシフトと温度のグラフ。 $K^a, K^c$  はそれぞれ  $a, c$  軸方向のナイトシフトである。挿入図は反強磁性の転移点と言われている  $T_N \sim 5\text{K}$  での異常がないことを示している。Reprinted figure with permission from H. Tou et al. Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 1374. Copyright 1998 by the American Physical Society.

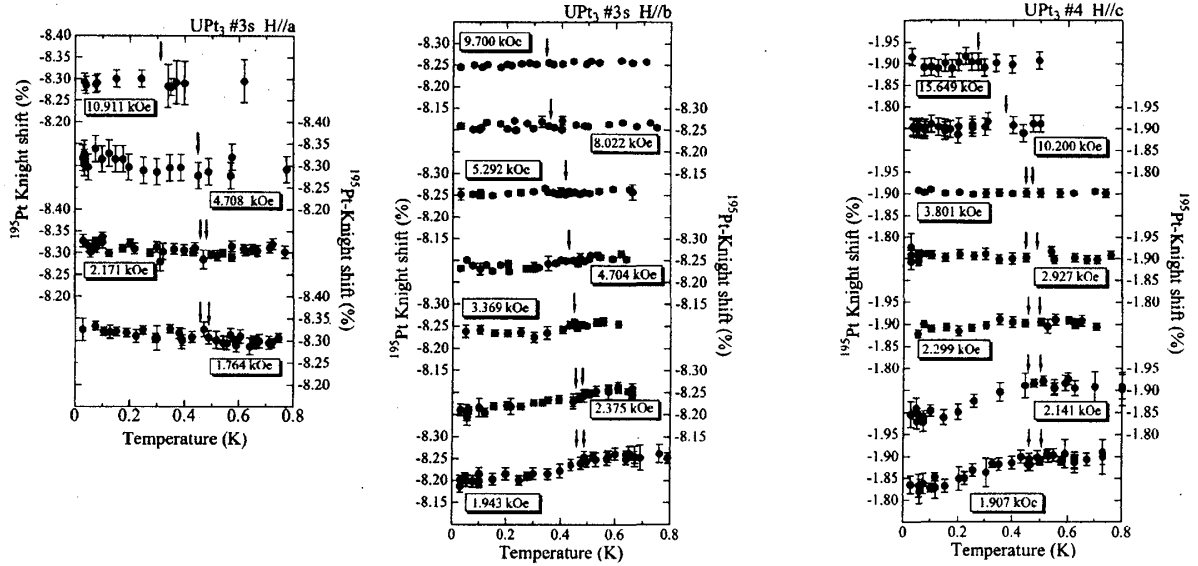


図 2.3:  $\text{UPt}_3$  の種々の磁場におけるナイトシフトと温度のグラフ。左から  $a, b, c$  軸方向のナイトシフトである。 $\downarrow$  は超伝導転移温度を示す。Reprinted figure with permission from H. Tou et al. Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3129. Copyright 1998 by the American Physical Society.

$\text{UPt}_3$  と同じ結晶構造の  $\text{UPd}_2\text{Al}_3$  の帯磁率の温度依存性から基底状態は  $f^2$  の  $L = 5, S = 1, J = 4$  の  $\Gamma_4$  一重項であると言われている [22]。また  $\text{UPt}_3$  の対応する温度スケールのナイトシフトを図

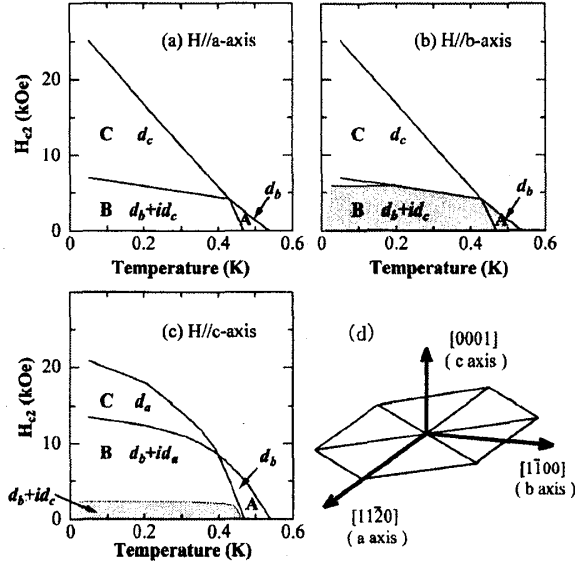


図 2.4:  $\text{UPt}_3$  の磁場 vs 温度相図。影の部分はナイトシフトが減少する領域。また推量された超伝導の  $d$  ベクトルの形も表示されている。Reprinted figure with permission from H. Tou et al. Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3129. Copyright 1998 by the American Physical Society.

2.2 に示す [20]。二つの物質の類似性から、 $\text{UPt}_3$  においても一重項基底状態が予想できる。 $\text{UPt}_3$  の温度と磁場の相図は図 2.4 のようになっている。

$\text{UPt}_3$  の超伝導相に関しては、種々の秩序変数が現象論的 (群論的な制限の元に) に提案されている [25]。しかし、超伝導を担っているはずの準粒子を元とした議論はほとんどなされていない。準粒子は  $f$  電子の局所的な性質を強く引き継いで、その相互作用は第一近似として不純物問題のものと等しいとおくことが期待できる。実際に帯磁率のほとんど全てと、比熱係数  $\gamma$  の 40% は  $f$  電子を不純物として見た時の寄与であることが報告されている [24]。本研究では、上記の実験事実を全て説明できるような理論は構築できないが、 $f^2$  のフェルミ液体論の基礎となる不純物問題の範囲で、超伝導を担っている準粒子の相互作用について調べる。

## 2.2 結晶場ハミルトニアン

$\text{UPt}_3$  の  $U$  サイトにおける局所的な対称性は点群  $D_{3h}$  である。この対称性での結晶場ハミルトニアン  $H_{\text{CEF}}$  は次のように書ける。

$$H_{\text{CEF}} = B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0 + B_6^0 O_6^0 + B_6^6 O_6^6 \quad (2.1)$$

ここで  $O_n^m$  はスチーブンスの等価演算子、 $B_n^m$  は定数である [16]。これらの行列要素は [17] で与えられている。

まず、仮定としてスピン軌道相互作用が大きく一体の  $j = 5/2$  の状態と  $j = 7/2$  の状態はエネルギー的に非常に離れているとする。エネルギーの低い  $j = 5/2$  の状態は  $2j + 1 = 6$  重に縮退しているが、この縮退は  $H_{\text{CEF}}$  により  $j_z = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$  の 3 つの準位に分裂する (表 2.1)。また LS スキームでの  $f^2$  結晶場準位は表 2.2 のようになっている。 $f^2$  状態の基底状態を  $\Gamma_4$  一重項と仮定すると、 $j_z = \pm 1/2$  と  $j_z = \pm 5/2$  だけで  $\Gamma_4$  の対称性は構成できるので  $j_z = \pm 3/2$  の状態は考えな

いことにする (群論的な制限から  $j = \pm 3/2$  を用いても一重項は構成できない (表 2.3))。また、同じ軌道に 2 個 f 電子が入ると強いクーロン斥力が働くため別々の軌道に入る状態だけを使って二粒子状態を挙げると表 2.4 のようになる。詳しく見ると  $f^1$  状態において分裂した  $\pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2$  の準位に  $xy$  面内での異方性は効いてこないことがわかる ( $j_z$  の固有状態になっていることから)。 $f^2$  状態ではその異方性が  $B_6^0, B_6^6$  により入ってくることがわかる。一体の状態を  $J = \frac{5}{2}$  に限ってしまうと、この異方性は考えることができない。従って本研究では次のように考える。まず、 $j = \frac{7}{2}$  の状態 2 つを用いて  $f^2$  状態を構成することを考えてみる。この状態はフント結合のエネルギーを得ることができるので、スピン軌道相互作用が大きい時にも  $f^2$  状態 (全角運動量  $J = 4$ ) に限ればエネルギーは下がっても良い。しかし、 $f^2$  状態が安定な場合に、伝導電子と混成することによる  $f^1$  状態への遷移を考えると、この中間状態のエネルギーはスピン軌道相互作用分だけ高くなる ( $f^3$  状態は考えないものとする)。このことから本研究ではこのような状態は低エネルギーでは重要でないとして考えない。異方性を再現するために最低限必要な状態は  $j = \frac{7}{2}, \frac{5}{2}$  の状態から作られる  $f^2$  状態である。 $j = \frac{7}{2}, \frac{5}{2}$  と  $j = \frac{5}{2}, \frac{5}{2}$  のなかで ( $J = 4, J_z = \pm 3$ ) の  $f^2$  状態を挙げると

$$|4; \pm 3\rangle_{\frac{5}{2}, \frac{5}{2}} = \pm f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{5}{2}}^\dagger f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{1}{2}}^\dagger |0\rangle$$

$$|4; \pm 3\rangle_{\frac{5}{2}, \frac{7}{2}} = \left[ \sqrt{\frac{15}{44}} f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{5}{2}}^\dagger f_{\frac{7}{2}, \pm \frac{1}{2}}^\dagger - \sqrt{\frac{49}{220}} f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{3}{2}}^\dagger f_{\frac{7}{2}, \pm \frac{3}{2}}^\dagger - \sqrt{\frac{3}{440}} f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{1}{2}}^\dagger f_{\frac{7}{2}, \pm \frac{5}{2}}^\dagger + \sqrt{\frac{189}{440}} f_{\frac{5}{2}, \pm \frac{1}{2}}^\dagger f_{\frac{7}{2}, \pm \frac{7}{2}}^\dagger \right] |0\rangle$$

がある。ここで  $f_{j,j_z}$  は全角運動量  $j$ 、その  $z$  成分が  $j_z$  の f 電子の消滅演算子である。これらの状態は伝導電子の混成を通じて混ざることがわかる (図 2.5)。よって、 $H_{\text{CEF}}$  とフント結合、およびスピン軌道相互作用を考慮に入れたハミルトニアンは  $J_z = \pm 3$  のヒルベルト空間の行列表示で次のようになる。

$$H \approx \begin{pmatrix} E_{\frac{5}{2}, \frac{5}{2}}^+ & \delta & 0 & \eta \\ \delta & E_{\frac{5}{2}, \frac{7}{2}}^+ & \eta & z \\ 0 & \eta & E_{\frac{5}{2}, \frac{5}{2}}^- & \delta \\ \eta & z & \delta & E_{\frac{5}{2}, \frac{7}{2}}^- \end{pmatrix}$$

ここで  $E_{j_1 j_2}^\pm$  は角運動量  $j_1, j_2$  から構成した  $J = 4, J_z = \pm 3$  の  $f^2$  状態のエネルギーの期待値である。また  $z$  は  $z \propto B_6^6$  の  $H_{\text{CEF}}$  からくる項で、 $\delta, \eta$  は  $\delta, \eta = O(v^2/E_{\Gamma_{7(8)}})$  で、伝導電子との混成からくる項である。また時間反転対称性から  $E_{j_1 j_2}^+ = E_{j_1 j_2}^- \equiv E_{j_1 j_2}$  である。次にこの行列の固有値  $\lambda$  のうち、 $\lambda = E_{\frac{5}{2}, \frac{5}{2}} + O(\delta^2, \eta^2, \delta\eta)$  であるような固有値および固有ベクトルを求めると次のよう

$(J = \frac{5}{2})$ 固有値	固有状態	$(J = \frac{7}{2})$ 固有値	固有状態
$10B_2^0 + 60B_4^0$	$ \pm \frac{5}{2}\rangle$	$-15B_2^0 + 540B_4^0 - 6300B_6^0$	$ \pm \frac{1}{2}\rangle$
$-8B_2^0 + 120B_4^0$	$ \pm \frac{1}{2}\rangle$	$-9B_2^0 - 180B_4^0 + 11340B_6^0$	$ \pm \frac{3}{2}\rangle$
$-2B_2^0 - 180B_4^0$	$ \pm \frac{3}{2}\rangle$	$e^+$	$a^+  \pm \frac{7}{2}\rangle + b^+  \mp \frac{5}{2}\rangle$
		$e^-$	$a^-  \pm \frac{7}{2}\rangle + b^-  \mp \frac{5}{2}\rangle$

表 2.1:  $D_{3h}$  での  $J = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$  の  $H_{\text{CEF}}$  の固有状態。 $e^\pm = 12B_2^0 - 180B_4^0 - 2520B_6^0 \pm \sqrt{(9B_2^0 + 600B_4^0 + 3780B_6^0)^2 + (360\sqrt{7}B_6^6)^2}$ 。また  $|a^\pm|^2 + |b^\pm|^2 = 1$

$(J = 4)$ 固有値	固有状態	対称性
$-20B_2^0 - 1080B_4^0 - 25200B_6^0$	$ 0\rangle$	$\Gamma_1$
$-17B_2^0 + 540B_4^0 + 1260B_6^0$	$ \pm 1\rangle$	$\Gamma_6$
$E_+$	$\alpha_+ \pm 4\rangle + \beta_+ \mp 2\rangle$	$\Gamma_5$
$E_-$	$\alpha_- \pm 4\rangle + \beta_- \mp 2\rangle$	$\Gamma_5$
$7B_2^0 - 1260B_4^0 - 21420B_6^0 + 2520B_6^6$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 3\rangle +  -3\rangle]$	$\Gamma_3$
$7B_2^0 - 1260B_4^0 - 21420B_6^0 - 2520B_6^6$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 3\rangle -  -3\rangle]$	$\Gamma_4$

表 2.2:  $D_{3h}$  での  $J = 4$  における  $H_{\text{CEF}}$  の固有状態。  $E_{\pm} = 10B_2^0 + 90B_4^0 + 16380B_6^0 \pm \sqrt{(18B_2^0 + 750B_4^0 + 11340B_6^0)^2 + (720\sqrt{7}B_6^6)^2}$ 。また、 $|\alpha_{\pm}|^2 + |\beta_{\pm}|^2 = 1$

$f^1 \otimes f^1$	$f^2$
$\Gamma_7 \otimes \Gamma_9$	$\Gamma_5 \oplus \Gamma_6$
$\Gamma_7 \otimes \Gamma_8$	$\Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$
$\Gamma_8 \otimes \Gamma_9$	$\Gamma_5 \oplus \Gamma_6$

表 2.3:  $D_{3h}$  での直積表現の既約分解。  $j_z = \pm 5/2 : \Gamma_8, j_z = \pm 1/2 : \Gamma_7, j_z = \pm 3/2 : \Gamma_9$

になる。

$$\lambda_{\pm} = E_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}} + A_{\pm} : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix} + O(\delta, \eta) \quad (2.2)$$

$$A_{\pm} = \frac{1}{W^2 - z^2} \left[ 2z\eta\delta - W(\delta^2 + \eta^2) \pm \sqrt{(W(\delta^2 + \eta^2) - 2z\eta\delta)^2 - (W^2 - z^2)(\delta^2 - \eta^2)^2} \right]$$

$$W = E_{\frac{5}{2}\frac{7}{2}} - E_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}}$$

基底状態をこの一重項ととるために  $z, \delta, \eta \ll E_{\frac{5}{2}\frac{7}{2}} - E_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}}$  であると仮定する。この二つの一重項間のエネルギー差  $K$  は

$$K = A_+ - A_- = \begin{cases} \frac{2z\delta^2}{W^2 - z^2} \propto B_6^6 & \text{for } \delta \gg \eta \\ \frac{2z\eta^2}{W^2 - z^2} \propto B_6^6 & \text{for } \eta \gg \delta \end{cases} \quad (2.3)$$

である。本研究では、 $\lambda_{\pm}$  は分裂したままで、(2.2) の固有ベクトルを  $\delta, \eta \ll E_{\frac{5}{2}\frac{7}{2}}, E_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}}$  で近似的に  $\frac{1}{\sqrt{2}}[|4; 3\rangle_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}} \pm |4; -3\rangle_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}}]$  とする。つまり  $j = \frac{7}{2}$  の状態は低エネルギーでの多体効果には寄与しないと考えられるので、 $f^2$  状態の準位を再現するためにだけ用いて、扱うヒルベルト空間には含めない。ここでは伝導電子との混成を考慮しての議論であるが、結晶場による直接的な  $J = 7/5$  と  $J = 5/2$  の行列要素を考慮しても同じ結果が得られる。しかし、現実にはどちらの寄与が支配的かは個々の物質によって異なると考えられる。また上記の議論は六方晶の場合であるが、正方晶の場合も同様に議論できる (立方晶の場合はさらに複雑である)。



jj 結合での $f^2$ 状態	jj 結合での $f^2$ 状態の角運動量表示	$f^2$ 状態 (LS)	対称性 ( $D_{3h}$ )
$\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\frac{5}{2}}^{\uparrow}f_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - f_{-\frac{1}{2}}^{\uparrow}f_{-\frac{5}{2}}^{\uparrow})$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 4; 3\rangle +  4; -3\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 4; 3\rangle +  4; -3\rangle]$	$\Gamma_3$
$f_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}f_{-\frac{5}{2}}^{\uparrow}, f_{\frac{5}{2}}^{\uparrow}f_{-\frac{1}{2}}^{\uparrow}$	$\frac{3}{\sqrt{14}} 4; \pm 2\rangle + \sqrt{\frac{5}{14}} 2; \pm 2\rangle$	$\alpha 4; \pm 4\rangle + \beta 4; \pm 2\rangle$	$\Gamma_5$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\frac{5}{2}}^{\uparrow}f_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} + f_{-\frac{1}{2}}^{\uparrow}f_{-\frac{5}{2}}^{\downarrow})$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 4; 3\rangle -  4; -3\rangle]$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[ 4; 3\rangle -  4; -3\rangle]$	$\Gamma_4$

表 2.4: 状態は  $|J; J_z\rangle$  と表している。また、 $\alpha, \beta$  は  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  の定数である。

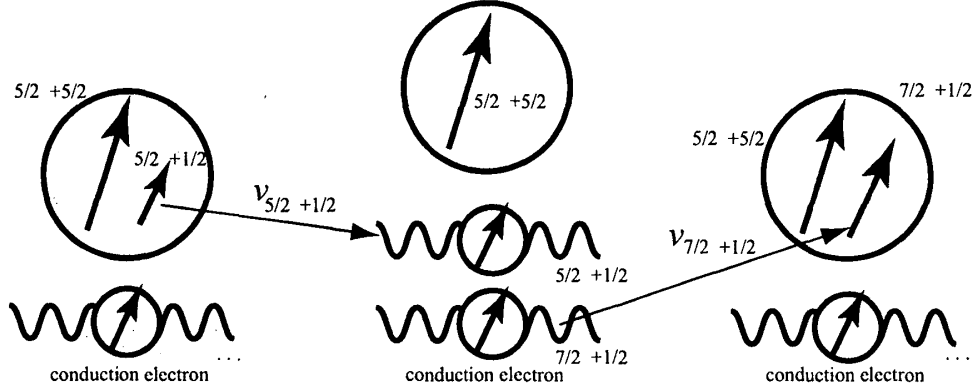


図 2.5:  $f^2$  状態の結晶場準位に対する伝導電子との混成の効果。矢印の脇の数字は  $(j, j_z)$  を表す。伝導電子と  $f$  電子は局所的な対称性の等しいものが混成すると仮定する。混成の強さを  $v_{j, j_z}$  と書いている。

#### 擬スピン表示：

表 2.4 のままでも良いのであるが、次のように  $f$  を書き直す。

$$f_{\frac{5}{2}} \rightarrow f_{A\uparrow}, \quad f_{-\frac{5}{2}} \rightarrow f_{A\downarrow} \quad (2.4)$$

$$f_{-\frac{1}{2}} \rightarrow f_{B\uparrow}, \quad f_{\frac{1}{2}} \rightarrow f_{B\downarrow} \quad (2.5)$$

$f^2$  状態は図 2.6 のように表せる。このように表示すると  $f^2$  の結晶場の分裂が、擬スピン-擬スピン間の異方的交換相互作用として書けることがわかる。よって、異方的フント結合として  $H_{\text{Hund}}$  を次のように書く。

$$H_{\text{Hund}} = -J_z S_A^z \cdot S_B^z - \frac{J_{\pm}}{2} [S_A^+ S_B^- + S_A^- S_B^+] \quad (2.6)$$

$$S_{\alpha}^z = \frac{1}{2} [f_{\alpha\uparrow}^{\dagger} f_{\alpha\uparrow} - f_{\alpha\downarrow}^{\dagger} f_{\alpha\downarrow}] \quad (2.7)$$

$$S_{\alpha}^+ = f_{\alpha\uparrow}^{\dagger} f_{\alpha\downarrow}, \quad S_{\alpha}^- = f_{\alpha\downarrow}^{\dagger} f_{\alpha\uparrow} \quad (2.8)$$

$E_{\Gamma_3}, E_{\Gamma_4}, E_{\Gamma_5}$  をそれぞれ  $f^2$  状態の  $\Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$  のエネルギーとすると、 $J_z, J_{\pm}$  は次のように表される。

$$J_z = K - 2\Delta, \quad J_{\pm} = -K \quad (2.9)$$

$$K \equiv E_{\Gamma_3} - E_{\Gamma_4}, \quad \Delta \equiv E_{\Gamma_5} - E_{\Gamma_4} \quad (2.10)$$

$$(2.11)$$

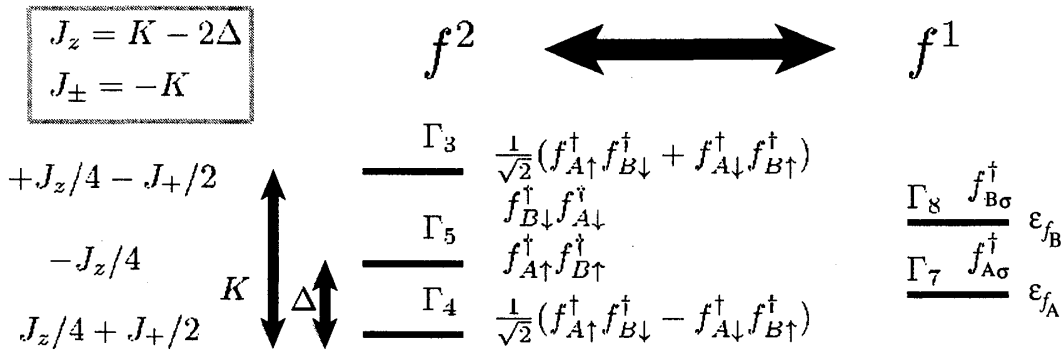


図 2.6:  $f^1, f^2$  状態の結晶場準位。この形の  $f^2$  状態は  $U_{AB}$  だけ  $f^1$  状態よりエネルギーが高いがここでは省略している。

### 2.3 2軌道アンダーソン模型+異方的フント結合

前節では、 $f^2$  の結晶場準位は擬スピン表現を用いて異方的フント結合で表されることを見た。それとともに、 $f$  電子の局所的な軌道の形から同じ軌道  $\alpha$  には大きなクーロン斥力が働く。そして  $f$  電子は同じ局所的な対称性を持つ伝導電子と混成する、と仮定する。交換相互作用は  $f^2$  の結晶場準位を議論した際に含まれているものとして扱う。そのようにして、考えるべきハミルトニアンは、「2軌道アンダーソン模型+異方的フント結合」ということになる。

$$H = H_c + H_{\text{loc}} + H_{\text{hyb}} + H_{\text{Hund}} \quad (2.12)$$

$$H_c = \sum_{k\alpha\mu} \epsilon_k c_{k\alpha\mu}^\dagger c_{k\alpha\mu} \quad (2.13)$$

$$H_{\text{loc}} = \sum_{\mu\alpha} \epsilon_{f\alpha} f_{\alpha\mu}^\dagger f_{\alpha\mu} + \sum_{\alpha} U_{\alpha} n_{f_{\alpha\uparrow}} n_{f_{\alpha\downarrow}} + U_{AB} \sum_{\mu\nu} n_{f_{A\mu}} n_{f_{B\nu}} \quad (2.14)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{k\mu\alpha} [V_{k\alpha} c_{k\alpha\mu} f_{\alpha\mu} + \text{h.c.}] \quad (2.15)$$

$$H_{\text{Hund}} = -J_z S_A^z \cdot S_B^z - \frac{J_{\pm}}{2} [S_A^+ S_B^- + S_A^- S_B^+] \quad (2.16)$$

ここで、 $\alpha = A, B$  である。以後、軌道の自由度に関しては  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  を、擬スピンの自由度に関しては  $\mu, \nu, \lambda, \rho$  を用いる。この模型は、四橋らによって、 $\text{URu}_2\text{Si}_2$  の不純物系での非フェルミ液体の起源の議論に用いられたものと同じものである [4]。1 軌道の時と全く同じように (2.12) に対して NRG の方法が適用可能である (独立な 2 種類の伝導電子バンドを対数離散化すればよい)。ただし、2 つの軌道  $A, B$  の伝導電子のバンド幅をフェルミ面を中心に  $2D$  とし、状態密度は一定とする。 $D$  で無次元化された NRG ハミルトニアン  $\bar{H}$  は次のように書ける。

$$\bar{H} = \bar{H}_c + \bar{H}_{\text{hyb}} + \bar{H}_f + \bar{H}_{\text{Hund}} \quad (2.17)$$

$$\bar{H}_c = \sum_{\alpha} \sum_{\mu} \sum_{n=0}^{\infty} t_{n\alpha} [f_{n\alpha\mu}^\dagger f_{n+1\alpha\mu} + f_{n+1\alpha\mu}^\dagger f_{n\alpha\mu}] \quad (2.18)$$

$$\bar{H}_{\text{hyb}} = \sum_{\alpha} \sum_{\mu} v_{\alpha} [f_{-1\alpha\mu}^\dagger f_{0\alpha\mu} + f_{0\alpha\mu}^\dagger f_{-1\alpha\mu}] \quad (2.19)$$

$$\bar{H}_f = \sum_{\alpha} \sum_{\mu} \bar{\epsilon}_{f\alpha} f_{-1\alpha\mu}^\dagger f_{-1\alpha\mu} + \sum_{\alpha} \bar{U}_{\alpha} f_{-1\alpha\uparrow}^\dagger f_{-1\alpha\uparrow} f_{-1\alpha\downarrow}^\dagger f_{-1\alpha\downarrow}$$

$$+\bar{U}_{AB} \sum_{\mu\nu} f_{-1A\mu}^\dagger f_{-1A\mu} f_{-1B\nu}^\dagger f_{-1B\nu} \quad (2.20)$$

$$\bar{H}_{\text{Hund}} = -\bar{J}_z S_A^z \cdot S_B^z - \frac{\bar{J}_\pm}{2} [S_A^+ S_B^- + S_A^- S_B^+] \quad (2.21)$$

表記は一軌道の時と同様である。繰り込み変換を考える時には (1.79) の  $\bar{H}_f \rightarrow \bar{H}_f + \bar{H}_{\text{Hund}}$  とすれば良い。(2.17) を図示すると図 2.7 のようになる。

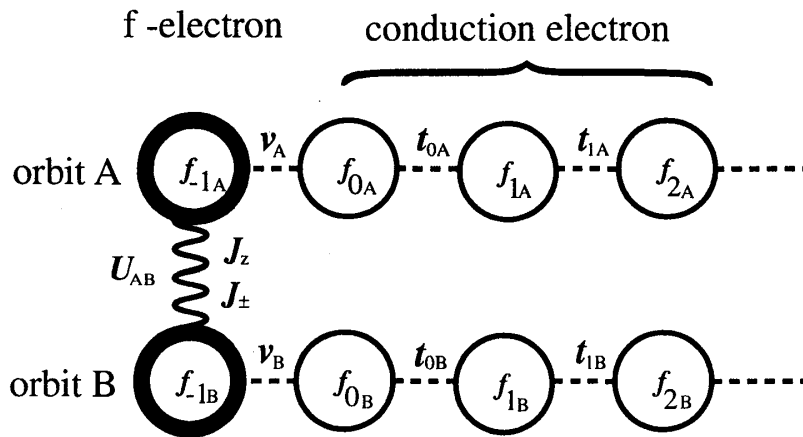


図 2.7: (2.17) の概念図。伝導電子はそれぞれ異なる軌道で混成する。

## 2.4 固定点での有効ハミルトニアン

この節では (2.17) の低エネルギーでの安定な二つの固定点について説明する。(2.17) は近藤効果 (f 電子と伝導電子が一重項を作る) と、結晶場一重項との競合が起きるモデルである。つまり二つの安定な固定点は

1. 近藤一重項固定点
2. 結晶場一重項固定点

である。この二つの間の微妙なパラメータ領域において 2 軌道近藤モデルと等価な非フェルミ液体 (NFL) の不安定固定点が存在する [4]。エントロピーを計算してみるとこのことがわかりやすい (図 2.8)。二つの固定点の描像は図 2.9、図 2.10 のようになる。

まず 1.5 節で行ったことと同じように、近藤一重項固定点での有効ハミルトニアンを考えてみる。この固定点でのエネルギースペクトルは、偶奇の入れ替わった自由電子のエネルギースペクトルである。また、演算子  $f_{0\alpha\mu}$  等は (1.120)(1.127) と同様の形に表せる。そのことから各軌道に対して、1.5 節で考えた演算子  $\hat{O}_1, \hat{O}_2$  が存在するというのは容易に想像できる。それらを  $\hat{O}_{1\alpha}, \hat{O}_{2\alpha}$  と書く。これらだけでは独立な 2 つの不純物がある場合と変わらないので、軌道間の相互作用の項が存在するはずである。ところで、系の対称性は、

- 各軌道での電荷保存則

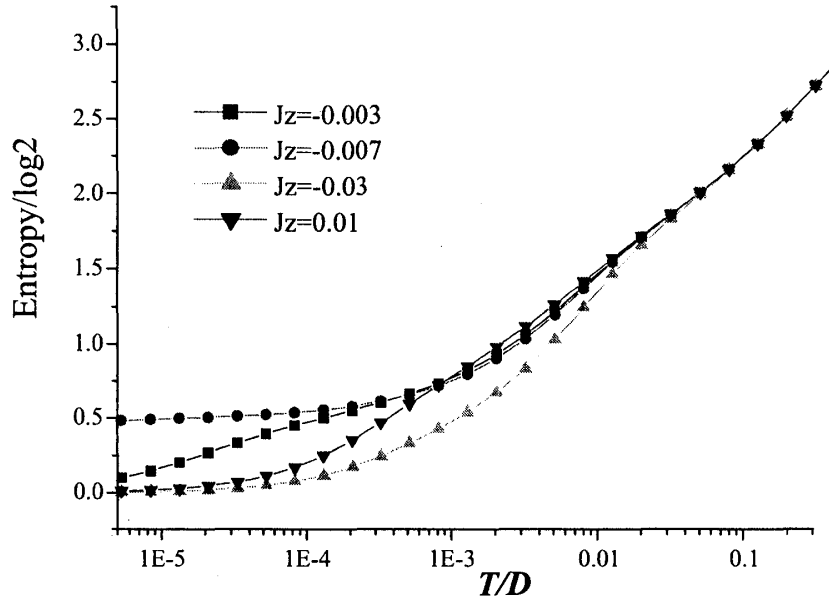


図 2.8: エントロピー v.s. 温度 2 軌道近藤模型の NFL 固定点では  $\frac{1}{2} \log 2$  であることが知られている ( $J_z = -0.007\dots$ )。パラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.2$ ,  $\bar{J}_\pm = -0.02$ 。

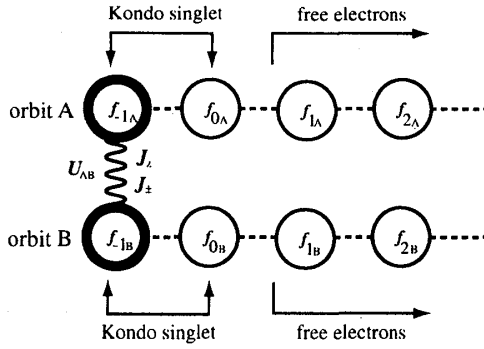


図 2.9: 近藤一重項固定点での描像

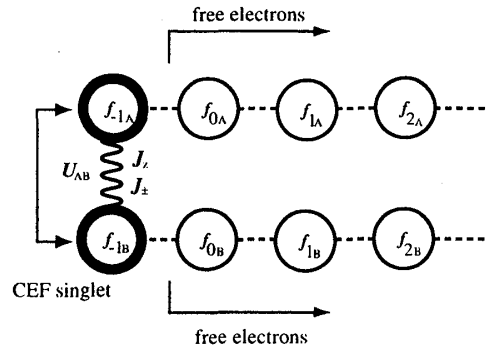


図 2.10: 結晶場一重項固定点での描像

- 全擬スピンの  $z$  成分の保存則

である。繰り込み変換の固有値  $\Lambda\lambda < 1$  で最も大きく、このような対称性を満たす項は次の形である。

$$\hat{O}_3 \equiv (f_{0A\mu}^\dagger f_{0A\mu} - 1)(f_{0B\nu}^\dagger f_{0B\nu} - 1) \quad (2.22)$$

$$\hat{O}_4 \equiv \frac{1}{4}(f_{0A\uparrow}^\dagger f_{0A\uparrow} - f_{0A\downarrow}^\dagger f_{0A\downarrow})(f_{0B\uparrow}^\dagger f_{0B\uparrow} - f_{0B\downarrow}^\dagger f_{0B\downarrow}) \quad (2.23)$$

$$\hat{O}_5 \equiv \frac{1}{2}[f_{0A\uparrow}^\dagger f_{0A\downarrow} f_{0B\downarrow}^\dagger f_{0B\uparrow} + f_{0A\downarrow}^\dagger f_{0A\uparrow} f_{0B\uparrow}^\dagger f_{0B\downarrow}] \quad (2.24)$$

$\hat{O}_3$  は電荷-電荷相互作用、 $\hat{O}_4$  はイジング型の擬スピンの  $z$  成分で書ける項、 $\hat{O}_5$  は擬スピンの  $xy$  面での相互作用項である。 $\hat{O}_3, \hat{O}_4, \hat{O}_5$  は、 $f^2$  状態のエネルギー準位の構造から生じたものであり、異方的フント結合という相互作用の形で準位を再現したことは無関係である。これらは全て  $\hat{O}_1$  の固有値と同じ固有値を持つことがすぐにわかる。

以上の7つで近藤-重項固定点での有効ハミルトニアンを作ることができる。それらの係数  $w_i$  を以下の様に書いて有効ハミルトニアンとする。

$$H_N^{\text{tot}} = H^* + \delta H_N \quad (2.25)$$

$$\delta H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{\alpha=A,B} [\tilde{t}_\alpha \hat{O}_{1\alpha} + \tilde{U}_\alpha \hat{O}_{2\alpha}] + \tilde{U}_{AB} \hat{O}_3 + \tilde{J}_z \hat{O}_4 + \tilde{J}_\pm \hat{O}_5 \right\} \quad (2.26)$$

この形の有効ハミルトニアンは [11] において、二不純物近藤模型の NRG による解析に用いられたものを拡張した形である。異なる点は、

- 電子正孔対称性がない。
- 軌道間の相互作用が異方的である。

の二点である。 $\hat{O}_{1\alpha}, \hat{O}_{2\alpha}$  を  $g_{\alpha\mu}$  等であらわした表式は (1.131), (1.132) と同じなので ( $\alpha_i^\pm \rightarrow \alpha_{i\alpha}^\pm$  等と書き換える)、以下に  $\hat{O}_3, \hat{O}_4, \hat{O}_5$  の表式を挙げておく (付録 A)。

$$\begin{aligned} \hat{O}_3 = & \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ijkl} \left[ \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^+ g_{Ai\mu}^\dagger g_{Aj\mu} + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^- g_{Ai\mu}^\dagger h_{Aj\bar{\mu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^+ h_{Ai\bar{\mu}} g_{Aj\mu} - \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^- h_{Ai\bar{\mu}}^\dagger h_{Aj\mu} \right] \\ & \times \left[ \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^+ g_{Bk\nu}^\dagger g_{Bl\mu} + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^- g_{Bk\nu}^\dagger h_{Bl\bar{\nu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^+ h_{Bk\bar{\nu}} g_{Bl\nu} - \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^- h_{Bk\bar{\nu}}^\dagger h_{Bl\nu} \right] \\ & + C_{2B} \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ij} \left[ \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^+ g_{Ai\mu}^\dagger g_{Aj\mu} + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^- g_{Ai\mu}^\dagger h_{Aj\bar{\mu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^+ h_{Ai\bar{\mu}} g_{Aj\mu} - \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^- h_{Ai\bar{\mu}}^\dagger h_{Aj\mu} \right] \\ & + C_{2A} \Lambda^{-(N-1)} \sum_{kl} \left[ \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^+ g_{Bk\nu}^\dagger g_{Bl\mu} + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^- g_{Bk\nu}^\dagger h_{Bl\bar{\nu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^+ h_{Bk\bar{\nu}} g_{Bl\nu} - \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^- h_{Bk\bar{\nu}}^\dagger h_{Bl\nu} \right] \\ & + \text{const.} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \hat{O}_4 = & \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ijkl} \frac{\mu\nu}{4} \left[ \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^+ g_{Ai\mu}^\dagger g_{Aj\mu} + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^- g_{Ai\mu}^\dagger h_{Aj\bar{\mu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^+ h_{Ai\bar{\mu}} g_{Aj\mu} - \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^- h_{Ai\bar{\mu}}^\dagger h_{Aj\mu} \right] \\ & \times \left[ \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^+ g_{Bk\nu}^\dagger g_{Bl\nu} + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^- g_{Bk\nu}^\dagger h_{Bl\bar{\nu}}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\nu} \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^+ h_{Bk\bar{\nu}} g_{Bl\nu} - \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^- h_{Bk\bar{\nu}}^\dagger h_{Bl\nu} \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \hat{O}_5 = & \Lambda^{-(N-1)} \sum_{ijkl} \frac{1}{2} \left[ \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^+ g_{Ai\mu}^\dagger g_{Aj\bar{\mu}} + \mu \alpha_{Ai}^+ \alpha_{Aj}^- g_{Ai\mu}^\dagger h_{Aj\mu}^\dagger \right. \\ & \left. + \bar{\mu} \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^+ h_{Ai\bar{\mu}} g_{Aj\bar{\mu}} + \alpha_{Ai}^- \alpha_{Aj}^- h_{Ai\bar{\mu}}^\dagger h_{Aj\bar{\mu}} \right] \end{aligned}$$

$$\times \left[ \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^+ g_{Bk\bar{\mu}}^\dagger g_{Bl\mu} + \bar{\mu} \alpha_{Bk}^+ \alpha_{Bl}^- g_{Bk\bar{\mu}}^\dagger h_{Bl\bar{\mu}}^\dagger + \bar{\mu} \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^+ h_{Bk\mu} g_{Bl\mu} + \alpha_{Bk}^- \alpha_{Bl}^- h_{Bk\bar{\mu}}^\dagger h_{Bl\mu} \right] \quad (2.29)$$

$$C_{2\alpha} = -\Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} [\alpha_{i\alpha}^{+2} - \alpha_{i\alpha}^{-2}] + 2 \sinh(\gamma_\alpha \ln \Lambda) \frac{1}{1 - \Lambda^{-1}} \alpha_0^2(K_\alpha) \quad (2.30)$$

(2.30) 内の  $K_\alpha, \gamma_\alpha$  は一軌道の時の (1.116)(1.125) と同様である。

エネルギースペクトルの解析は、一軌道の時と同様に  $\delta H_N$  の一次摂動で良い。表 2.5 にその期待値を示す。取り扱う状態は  $g_{\alpha 1\mu}, h_{\beta 1\nu}$  で構成できるものだけに限った。それでも、低エネルギーのスペクトルはほとんど全てこれらの状態で尽くされる。

結晶場一重項固定点においても、実は有効ハミルトニアンは (2.26) と全く同じ形になる。一軌道の時と同様に、(2.26) がどの程度固定点の近くで数値計算により得られたエネルギースペクトルを再現できるか、を表 2.6 に示す。1 軌道の場合よりも格段に精度が落ちているが、これは残す状態数が 2 軌道にすると現実的な数では不十分であるためと考えられる。また NFL の臨界点に近づくにつれ精度は悪くなる。 $\tilde{U}_{AB}$  は 3 章で見るように、f 電子の電荷揺らぎが抑えられたパラメータ領域では  $\tilde{U}_{AB} \sim 0$  となるため、他の  $\tilde{U}_\alpha$  等よりも精度が相対的に落ちた。また、 $C_{2\alpha}$  についても、1 軌道の時のような精度はでなかった。最も大きい誤差で約 10 % のずれが生じた。しかし大部分の状態については 1 % 前後の誤差の範囲でフィッティングができた。エネルギースペクトルの再現性は精度が落ちるが、有効ハミルトニアンのパラメータは真の値とほとんど同じであることが期待される。なぜならここでは示していないが、残す状態数を多くしていった時に、パラメータの値はほとんど変化せず、エネルギースペクトルの再現性だけが良くなっていくからである。本研究では大部分の計算は 3000 個を残して行ったが、最大で 4000 個の状態を残しても計算を行った。

指標	状態	$(Q_A, Q_B, 2S)$	$\delta H_N \times \Lambda^{(N-1)/2}$
1,2(1)	$h_{A1\sigma}^\dagger$	(-1,0,1)	$2\tilde{t}_A\alpha_{A1}^{-2}\eta_{A1}^- - w_A\alpha_{A1}^{-2}(\equiv \delta H_1)$
3,4(2)	$g_{B1\sigma}^\dagger$	(0,1,1)	$2\tilde{t}_B\alpha_{B1}^{+2}\eta_{B1}^+ + w_B\alpha_{B1}^{+2}(\equiv \delta H_2)$
5,6(3)	$h_{B1\sigma}^\dagger$	(0,-1,1)	$2\tilde{t}_B\alpha_{B1}^{-2}\eta_{B1}^- - w_B\alpha_{B1}^{-2}(\equiv \delta H_3)$
7,8(4)	$g_{A1\sigma}^\dagger$	(1,0,1)	$2\tilde{t}_A\alpha_{A1}^{+2}\eta_{A1}^+ + w_A\alpha_{A1}^{+2}(\equiv \delta H_4)$
9(5)	$h_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger$	(-1,-1,2)	$\delta H_1 + \delta H_3 + (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{-2}$
10(5)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[h_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger + h_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_1 + \delta H_3 + (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4 + \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{-2}$
11(5)	$h_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_1 + \delta H_3 + (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{-2}$
12(9)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[h_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger - h_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$	(-1,-1,0)	$\delta H_1 + \delta H_3 + (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4 - \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{-2}$
14(7)	$h_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger$	(-1,1,2)	$\delta H_1 + \delta H_2 - (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{+2}$
15(7)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[h_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger + h_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_1 + \delta H_2 - (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4 - \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{+2}$
16(7)	$h_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_1 + \delta H_2 - (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{+2}$
17(8)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[h_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger - h_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger]$	(-1,1,0)	$\delta H_1 + \delta H_2 - (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4 + \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{-2}\alpha_{B1}^{+2}$
18(10)	$g_{A1\uparrow}^\dagger h_{A1\uparrow}^\dagger$	(0,0,2)	$\delta H_1 + \delta H_4 - 2\tilde{U}_A\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{A1}^{-2}$
19(10)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger h_{A1\downarrow}^\dagger + g_{A1\downarrow}^\dagger h_{A1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_1 + \delta H_4 - 2\tilde{U}_A\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{A1}^{-2}$
20(10)	$g_{A1\downarrow}^\dagger h_{A1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_1 + \delta H_4 - 2\tilde{U}_A\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{A1}^{-2}$
21(12)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger h_{A1\downarrow}^\dagger - g_{A1\downarrow}^\dagger h_{A1\uparrow}^\dagger]$	(0,0,0)	$\delta H_1 + \delta H_4 + 2\tilde{U}_A\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{A1}^{-2}$
22(11)	$g_{B1\uparrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger$	(0,0,2)	$\delta H_2 + \delta H_3 - 2\tilde{U}_B\alpha_{B1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
23(11)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{B1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger + g_{B1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_2 + \delta H_3 - 2\tilde{U}_B\alpha_{B1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
24(11)	$g_{B1\downarrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_2 + \delta H_3 - 2\tilde{U}_B\alpha_{B1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
25(13)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{B1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger - g_{B1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$	(0,0,0)	$\delta H_2 + \delta H_3 + 2\tilde{U}_B\alpha_{B1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
28(16)	$g_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger$	(1,1,2)	$\delta H_2 + \delta H_4 + (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{+2}$
29(16)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger + g_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_2 + \delta H_4 + (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4 + \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{+2}$
30(16)	$g_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_2 + \delta H_4 + (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{+2}$
31(17)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger - g_{A1\downarrow}^\dagger g_{B1\uparrow}^\dagger]$	(1,1,0)	$\delta H_2 + \delta H_4 + (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4 - \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{+2}$
32(18)	$g_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger$	(1,-1,2)	$\delta H_3 + \delta H_4 - (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
33(18)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger + g_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$		$\delta H_3 + \delta H_4 - (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4 - \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
34(18)	$g_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger$		$\delta H_3 + \delta H_4 - (\tilde{U}_{AB} - \tilde{J}_z/4)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
35(19)	$\frac{1}{\sqrt{2}}[g_{A1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger - g_{A1\downarrow}^\dagger h_{B1\uparrow}^\dagger]$	(1,-1,0)	$\delta H_3 + \delta H_4 - (\tilde{U}_{AB} + \tilde{J}_z/4 + \tilde{J}_\pm/2)\alpha_{A1}^{+2}\alpha_{B1}^{-2}$
13(6)	$h_{A1\uparrow}^\dagger h_{A1\downarrow}^\dagger$	(-2,0,0)	$2(\delta H_1 + \tilde{U}_A\alpha_{A1}^{-4})$
26(14)	$h_{B1\uparrow}^\dagger h_{B1\downarrow}^\dagger$	(0,-2,0)	$2(\delta H_3 + \tilde{U}_B\alpha_{B1}^{-4})$
27(15)	$g_{B1\uparrow}^\dagger g_{B1\downarrow}^\dagger$	(0,2,0)	$2(\delta H_2 + \tilde{U}_B\alpha_{B1}^{+4})$
36(20)	$g_{A1\uparrow}^\dagger g_{A1\downarrow}^\dagger$	(2,0,0)	$2(\delta H_4 + \tilde{U}_A\alpha_{A1}^{+4})$

表 2.5: 各状態の  $\delta H_N$  の期待値。指標の括弧内の数字は擬スピン空間が等方的な時に用いる。また、 $w_\alpha = C_{2\alpha}\tilde{U}_\alpha + C_{2\bar{\alpha}}\tilde{U}_{AB}$

$N = 30$ 

index	$H_N^{\text{tot}} - H^*$ (数値計算)	$\delta H_N$ (一次摂動)	%
1	-0.26998E-04	-0.26998E-04	input
2	-0.11331E-04	-0.11331E-04	input
3	-0.11076E-04	-0.11076E-04	input
4	-0.27003E-04	-0.27003E-04	input
5	-0.19871E-04	-0.19875E-04	100.02
6	-0.12068E-05	-0.12052E-05	99.86
7	-0.20271E-04	-0.20269E-04	99.99
8	-0.93231E-04	-0.93227E-04	100.00
9	-0.91965E-04	-0.91969E-04	100.00
10	-0.10909E-03	-0.10711E-03	98.18
11	-0.41405E-04	-0.43386E-04	104.78
12	-0.90056E-06	-0.89812E-06	99.73
13	-0.14228E-05	-0.14289E-05	100.43
14	-0.14086E-05	-0.14223E-05	100.97
15	-0.14467E-05	-0.14326E-05	99.03
16	-0.19815E-04	-0.19808E-04	99.96
17	-0.93206E-04	-0.93197E-04	99.99
18	-0.20128E-04	-0.20127E-04	99.99
19	-0.92648E-04	-0.92647E-04	100.00
20	-0.58757E-06	-0.58923E-06	100.28
<hr/>			
$\tilde{t}_A = -23.460 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{t}_B = -11.413 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{U}_A = 75.964 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{U}_B = 41.300 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{U}_{AB} = 0.59724 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{J} = 244.13 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{w}_A = 6.1620 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$\tilde{w}_B = 5.0998 \times \Lambda^{-(N-1)/2}$			
$C_{2A} = 0.79678\text{E-}01$			
$C_{2B} = 0.11899$			
$\tilde{w}_A / (C_{2A}\tilde{U}_A + C_{2B}\tilde{U}_{AB}) = 1.0062$			
$\tilde{w}_B / (C_{2B}\tilde{U}_B + C_{2A}\tilde{U}_{AB}) = 1.0278$			

表 2.6: 有効ハミルトニアン (2.26) の妥当性。  $\bar{J}_z = \bar{J}_\pm \equiv \bar{J}$  の場合。この時は全擬スピン  $\vec{S}_A + \vec{S}_B$  で状態を保存できて精度が上がる。このパラメータでは近藤一重項固定点だが、結晶場一重項固定点においても同程度の精度である。  $\tilde{w}_\alpha$  もフィッティングパラメータとして扱っている。パラメータは  $\bar{\epsilon}_{fA} = -0.5, \bar{\epsilon}_{fB} = -0.6, \bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0, v_A = v_B = 0.2, \bar{U}_{AB} = 0.5, \bar{J} = -0.04, \Lambda = 2.5$ 。状態は 4000 個を残して計算を行った。  $\tilde{U}_A, \tilde{U}_B, \tilde{U}_{AB}, \tilde{J}$  については複数の状態から独立に計算し、その平均値を用いている。



## 2.5 物理量の表式

比熱等の熱力学量の表式は一軌道の時と同様の方法で計算される。ここではその結果を挙げておく。いずれの結果も低温での表式である。

比熱：

$$C/T = C^0/T + \frac{4\pi^2}{3A_\Lambda} \left[ -\tilde{t}_A \frac{\phi(K_A)}{2} - \tilde{t}_B \frac{\phi(K_B)}{2} \right] \quad (2.31)$$

擬スピン感受率：

$$\begin{aligned} \chi_s = \chi_s^0 + \sum_{\alpha=A,B} \left\{ -\tilde{t}_\alpha \frac{\phi(K_\alpha)}{2A_\Lambda} + \tilde{U}_\alpha \frac{(1+\Lambda^{-1})}{8} \left[ \frac{\phi(K_\alpha)}{A_\Lambda} \right]^2 \right\} \\ - \tilde{J}_z \frac{1+\Lambda^{-1}}{16} \frac{\phi(K_A)\phi(K_B)}{A_\Lambda^2} \end{aligned} \quad (2.32)$$

電荷感受率：

$$\begin{aligned} \chi_c = \chi_c^0 + \sum_{\alpha=A,B} \left\{ -\tilde{t}_\alpha \frac{\phi(K_\alpha)}{2A_\Lambda} - \tilde{U}_\alpha \frac{(1+\Lambda^{-1})}{8} \left[ \frac{\phi(K_\alpha)}{A_\Lambda} \right]^2 \right\} \\ - \tilde{U}_{AB} \frac{1+\Lambda^{-1}}{4} \frac{\phi(K_A)\phi(K_B)}{A_\Lambda^2} \end{aligned} \quad (2.33)$$

ウィルソン比：

$$\begin{aligned} R &= \frac{4\pi^2}{3} \frac{T(\chi_s - \chi_s^0)}{C - C^0} \\ &= 1 - \frac{1+\Lambda^{-1}}{4A_\Lambda} \frac{\tilde{U}_A \phi^2(K_A) - \tilde{J}_z/2 \phi(K_A)\phi(K_B) + \tilde{U}_B \phi^2(K_B)}{\tilde{t}_A \phi(K_A) + \tilde{t}_B \phi(K_B)} \end{aligned} \quad (2.34)$$

(2.32) に関して、横方向の帯磁率の場合は  $\tilde{J}_z \rightarrow \tilde{J}_\pm$  と置き換えればよい。

## 第3章 二軌道局所フェルミ液体論

ここでは、ダイアグラムの方法を用いて、軌道が2個ある場合の局所フェルミ液体 (LFL) での比熱、帯磁率、等の表式を導出する。多軌道アンダーソン模型のこのような議論は、d 電子系を念頭においた議論が70年代になされた[12, 13, 14]。異方的な場合の現象論は[7]でも議論された。 $f^2$  模型を念頭におく本研究でもそこでの議論に沿って考えることができる。

### 3.1 ダイアグラムの方法の準備

この章で考えるハミルトニアンは二軌道アンダーソン模型を一般化した以下のハミルトニアンである。

$$H = \sum_{k\sigma\alpha} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha\sigma}^\dagger c_{k\alpha\sigma} + \sum_{k\sigma\alpha} [V_{k\alpha} c_{k\alpha\sigma}^\dagger f_{\alpha\sigma} + \text{h.c.}] + \sum_{\alpha\sigma} (\epsilon_{f\alpha} - \delta h_\sigma^\alpha) n_{f\alpha\sigma} + H_{\text{int}} \quad (3.1)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} f_{\alpha\sigma_1}^\dagger f_{\beta\sigma_2}^\dagger U_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\alpha\beta\gamma\delta(0)} f_{\delta\sigma_4} f_{\gamma\sigma_3} \quad (3.2)$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  は軌道を表し、 $\sigma_i$  はスピンを表す。また相互作用項  $H_{\text{int}}$  は摂動展開の便宜上以下では対称化したものを使う[29]。すなわち、

$$\int dt H_{\text{int}} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \iiint dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 f_{\alpha\sigma_1}^\dagger(t_1) f_{\beta\sigma_2}^\dagger(t_2) \Gamma_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\alpha\beta\gamma\delta(0)}(t_1, t_2, t_3, t_4) f_{\delta\sigma_4}(t_4) f_{\gamma\sigma_3}(t_3) \quad (3.3)$$

と書く。ここで  $\Gamma_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\alpha\beta\gamma\delta(0)}(t_1, t_2, t_3, t_4)$  は  $(t_1, \alpha, \sigma_1)$  と  $(t_2, \beta, \sigma_2)$  及び、 $(t_3, \gamma, \sigma_3)$  と  $(t_4, \delta, \sigma_4)$  の入れ替えについて反対称な関数である。絶対零度での f 電子グリーン関数は対角項のみ残って、

$$G_{f\sigma}^\alpha(t) = -i \langle T[f_{\alpha\sigma}(t) f_{\alpha\sigma}^\dagger(0)] \rangle = \frac{1}{2\pi} \int d\omega G_{f\sigma}^\alpha(\omega, \delta h) e^{-i\omega t} \quad (3.4)$$

$$G_{f\sigma}^\alpha(\omega, \delta h) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{f\alpha} + \delta h_\sigma^\alpha + i\Delta_\alpha \text{sgn}(\omega) - \Sigma_\sigma^\alpha(\omega, \delta h)} \quad (3.5)$$

$$\Delta_\alpha = \pi \rho^\alpha(\epsilon_F) V_\alpha^2 \quad (3.6)$$

ここで、 $V_{k\alpha}$  は一定と単純化した。「 $\delta h$ 」は記号的に  $\delta h_\sigma^\alpha$  の全ての成分を表わすものとする。また  $\Sigma_\sigma^\alpha(\omega, \delta h)$  は f 電子の自己エネルギー、 $T$  は時間順序積を表す。

### 3.2 熱力学量

「系はフェルミ液体状態にある」ということを仮定して議論を進める [30]。このことから準粒子のエネルギーは次の方程式の解である。

$$\omega = \epsilon_{f\alpha} - \delta h_\sigma^\alpha + \Sigma_\sigma^\alpha(\omega, \delta h) \quad (3.7)$$

$\omega$  と  $\delta h$  が小さいとして自己エネルギーを展開すると、

$$\epsilon_{\alpha\sigma}^{\text{quasi}} = z_\sigma^\alpha (\epsilon_{f\alpha} + \Sigma_\sigma^\alpha(0, 0)) - z_\sigma^\alpha \sum_{\beta\sigma'} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\sigma\sigma'} - \frac{d\Sigma_\sigma^\alpha(0, 0)}{d\delta h_{\sigma'}^\beta}) \delta h_{\sigma'}^\beta \quad (3.8)$$

$$z_\sigma^\alpha = (1 - \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0, 0)}{\partial \omega})^{-1} \quad (3.9)$$

$z_\sigma^\alpha$  はスピン  $\sigma$ 、軌道  $\alpha$  の f 電子の繰り込み因子である。フェルミ面付近の状態密度は次のように書ける。

$$\nu_F^{\alpha\sigma} = \rho_{F\sigma}^\alpha \frac{d\epsilon_{f\alpha}}{d\epsilon_{\alpha\sigma}^{\text{quasi}}} = (z_\sigma^\alpha)^{-1} \rho_{F\sigma}^\alpha \quad (3.10)$$

$$\rho_{F\sigma}^\alpha = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta_\alpha}{(\epsilon_f^\alpha + \Sigma_\sigma^\alpha(0))^2 + \Delta_\alpha^2}$$

$\alpha$  軌道による f 電子の比熱は、

$$C^\alpha = \frac{2\pi^2}{3} \rho_{F\sigma}^\alpha (z_\sigma^\alpha)^{-1} \quad (3.11)$$

となる。

次に帯磁率と電荷感受率を求める。前者の場合は  $\delta h_\sigma^\alpha \rightarrow \sigma h/2$ 、後者の場合は  $\delta h_\sigma^\alpha \rightarrow \mu/2$  とすればよい。磁化  $m_\alpha$  は

$$\begin{aligned} m_\alpha &= \nu_F^{\alpha\uparrow} \epsilon_{\alpha\uparrow}^{\text{quasi}} - \nu_F^{\alpha\downarrow} \epsilon_{\alpha\downarrow}^{\text{quasi}} \\ &= \rho_F^\alpha (-1 + \frac{\partial \Sigma_\uparrow^\alpha(0, 0)}{\partial h} - \frac{\partial \Sigma_\downarrow^\alpha(0, 0)}{\partial h}) h \end{aligned} \quad (3.12)$$

ここで、磁場がなければ  $\rho_{F\sigma}^\alpha = \rho_F^\alpha$  である。フェルミ面付近の粒子数変化  $\delta N_\alpha$  は同様に、

$$\begin{aligned} \delta N_\alpha &= \nu_F^{\alpha\uparrow} \epsilon_{\alpha\uparrow}^{\text{quasi}} + \nu_F^{\alpha\downarrow} \epsilon_{\alpha\downarrow}^{\text{quasi}} \\ &= \rho_F^\alpha (-1 + \frac{\partial \Sigma_\uparrow^\alpha(0, 0)}{\partial \mu} + \frac{\partial \Sigma_\downarrow^\alpha(0, 0)}{\partial \mu}) \mu \end{aligned} \quad (3.13)$$

よって、帯磁率、電荷感受率は以下のようにになる。

$$2\chi_s^\alpha = -\frac{dm_\alpha}{dh} = \rho_F^\alpha \left[ 1 - \frac{\partial \Sigma_\uparrow^\alpha(0, 0)}{\partial h} + \frac{\partial \Sigma_\downarrow^\alpha(0, 0)}{\partial h} \right] \quad (3.14)$$

$$2\chi_c^\alpha = -\frac{dN_\alpha}{d\mu} = \rho_F^\alpha \left[ 1 - \frac{\partial \Sigma_\uparrow^\alpha(0, 0)}{\partial \mu} - \frac{\partial \Sigma_\downarrow^\alpha(0, 0)}{\partial \mu} \right] \quad (3.15)$$

これらは元の変数を用いて次のようにも表せる ( $s: -, c: +$ )。

$$2\chi_{s(c)}^\alpha = \rho_F^\alpha \left[ 1 - \frac{1}{2} \sum_{\beta\sigma} \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0, 0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \pm \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0, 0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \right) \right] \quad (3.16)$$

最後に軌道感受率を考える。 $(\delta h_\sigma^\alpha \rightarrow \alpha h'/2)$  帯磁率等と同様に、

$$\begin{aligned} 2\chi_\sigma^{\text{orb}} &= -\left(\nu_F^{\uparrow\sigma} \epsilon_{\uparrow\sigma}^{\text{quasi}} - \nu_F^{\downarrow\sigma} \epsilon_{\downarrow\sigma}^{\text{quasi}}\right)/h' \\ &= \left[\frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow} + \rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} - \left(\rho_{F\sigma}^{\uparrow} \frac{\partial \Sigma_\sigma^{\uparrow}(0,0)}{\partial h'} - \rho_{F\sigma}^{\downarrow} \frac{\partial \Sigma_\sigma^{\downarrow}(0,0)}{\partial h'}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$= \left[\frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow} + \rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} - \frac{1}{2}\left(\rho_{F\sigma}^{\uparrow} \sum_{\sigma'\beta} \beta \frac{\partial \Sigma_\sigma^{\uparrow}(0,0)}{\partial h'^\beta_{\sigma'}} - \rho_{F\sigma}^{\downarrow} \sum_{\sigma'\beta} \beta \frac{\partial \Sigma_\sigma^{\downarrow}(0,0)}{\partial h'^\beta_{\sigma'}}\right)\right] \quad (3.18)$$

のように表せる。

### 3.3 ワード恒等式を用いた計算

$\delta h$  を無限小量として、その時の  $f$  電子グリーン関数の 1 次補正を考えてみる。

$$V_{\text{int}}(t) = -\sum_{\lambda\mu} \delta h_\mu^\lambda f_{\lambda\mu}^\dagger(t) f_{\lambda\mu}(t) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \delta G_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta(1)}(t) &= \sum_{\lambda\mu} \delta h_\mu^\lambda \int dt' \langle T[f_{\alpha\sigma}(t) f_{\beta\sigma'}^\dagger(0) f_{\lambda\mu}^\dagger(t') f_{\lambda\mu}(t')] \rangle \\ &\quad - \sum_{\lambda\mu} \delta h_\mu^\lambda \int dt' \langle T[f_{\alpha\sigma}(t) f_{\beta\sigma'}^\dagger(0)] \rangle \langle f_{\lambda\mu}^\dagger(t') f_{\lambda\mu}(t') \rangle \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$= \sum_{\lambda\mu} \delta h_\mu^\lambda \int dt' \left[ G_{\sigma\mu\sigma'\mu}^{\text{two}\alpha\lambda\beta\lambda}(t, t'; 0, t') - G_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}(t) G_{\mu\mu}^{\lambda\lambda}(0) \right] \quad (3.21)$$

ここで

$$G_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\text{two}\alpha\beta\gamma\delta}(t_1, t_2, t_3, t_4) = \langle T[f_{\alpha\sigma_1}(t_1) f_{\beta\sigma_2}(t_2) f_{\gamma\sigma_3}^\dagger(t_3) f_{\delta\sigma_4}^\dagger(t_4)] \rangle \quad (3.22)$$

は二粒子グリーン関数である。二粒子グリーン関数は以下の関係で、完全なバーテックス  $\Gamma_{\sigma'_1\sigma'_2\sigma'_3\sigma'_4}^{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}(t'_1, t'_2, t'_3, t'_4)$  と関係している。

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\text{two}\alpha\beta\gamma\delta}(t_1, t_2, t_3, t_4) &= G_{\sigma_1\sigma_3}^{\alpha\gamma}(t_1 - t_3) G_{\sigma_2\sigma_4}^{\beta\delta}(t_2 - t_4) - G_{\sigma_1\sigma_4}^{\alpha\delta}(t_1 - t_4) G_{\sigma_2\sigma_3}^{\beta\gamma}(t_2 - t_3) \\ &\quad + i \iiint dt'_1 dt'_2 dt'_3 dt'_4 G_{\sigma_1\sigma'_1}^{\alpha\rho_1}(t_1 - t'_1) G_{\sigma_2\sigma'_2}^{\beta\rho_2}(t_2 - t'_2) \\ &\quad \times \Gamma_{\sigma'_1\sigma'_2\sigma'_3\sigma'_4}^{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}(t'_1, t'_2, t'_3, t'_4) G_{\sigma'_3\sigma_3}^{\rho_3\gamma}(t'_3 - t_3) G_{\sigma'_4\sigma_4}^{\rho_4\delta}(t'_4 - t_4) \end{aligned} \quad (3.23)$$

(3.23) を (3.21) に代入すると、

$$\begin{aligned} \delta G_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta(1)}(t) &= \sum_{\lambda\mu} \delta h_\mu^\lambda \int dt' \left\{ -G_{\sigma\mu}^{\alpha\lambda}(t - t') G_{\mu\sigma'}^{\lambda\beta}(t') \right. \\ &\quad + i \iiint dt'_1 dt'_2 dt'_3 dt'_4 G_{\sigma\sigma'_1}^{\alpha\rho_1}(t - t'_1) G_{\mu\sigma'_2}^{\lambda\rho_2}(t' - t'_2) \\ &\quad \times \Gamma_{\sigma'_1\sigma'_2\sigma'_3\sigma'_4}^{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}(t'_1, t'_2, t'_3, t'_4) G_{\sigma'_3\sigma'}^{\rho_3\beta}(t'_3) G_{\sigma'_4\mu}^{\rho_4\lambda}(t'_4 - t') \left. \right\} \end{aligned} \quad (3.24)$$

(3.24) をフーリエ変換すると、

$$\delta G_{\sigma\sigma'}^{\alpha\beta(1)}(\omega) = \sum_{\lambda\mu} \delta h_{\mu}^{\lambda} \left\{ -G_{\sigma\mu}^{\alpha\lambda}(\omega) G_{\mu\sigma'}^{\lambda\beta}(\omega) + i \int d\nu G_{\sigma\sigma_1'}^{\alpha\rho_1}(\omega) G_{\mu\sigma_2'}^{\lambda\rho_2}(\nu) \right. \\ \left. \times \Gamma_{\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3'\sigma_4'}^{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}(\omega, \nu, \omega, \nu) G_{\sigma_3'\sigma_4'}^{\rho_3\beta}(\omega) G_{\sigma_4'\mu}^{\rho_4\lambda}(\nu) \right\} \quad (3.25)$$

となる。ここで  $d\nu \equiv \frac{d\nu}{2\pi}$  である。f 電子グリーン関数はスピンと軌道について対角的なので

$$\delta G_{\sigma}^{\alpha(1)}(\omega) = -\delta h_{\sigma}^{\alpha} [G_{\sigma}^{\alpha}(\omega)]^2 + i [G_{\sigma}^{\alpha}(\omega)]^2 \int d\nu \sum_{\lambda\mu} \delta h_{\mu}^{\lambda} [G_{\mu}^{\lambda}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, \nu, \omega, \nu) \quad (3.26)$$

$$\delta [G_{\sigma}^{\alpha(1)}(\omega)]^{-1} = \delta h_{\sigma}^{\alpha} - i \int d\nu \sum_{\lambda\mu} \delta h_{\mu}^{\lambda} [G_{\mu}^{\lambda}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, \nu, \omega, \nu) \quad (3.27)$$

と書ける。よって、 $\delta h_{\sigma}^{\alpha} \rightarrow 0$  の極限において、

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\omega)}{\partial h_{\mu}^{\lambda}} = i \int d\nu [G_{\mu}^{\lambda}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, \nu, \omega, \nu) \quad (3.28)$$

これが求める最初のワード恒等式である。(3.28) をダイアグラムで表すと図 3.1 のようになる。

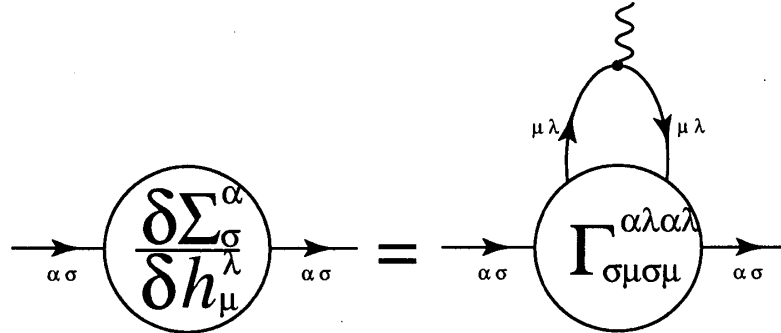
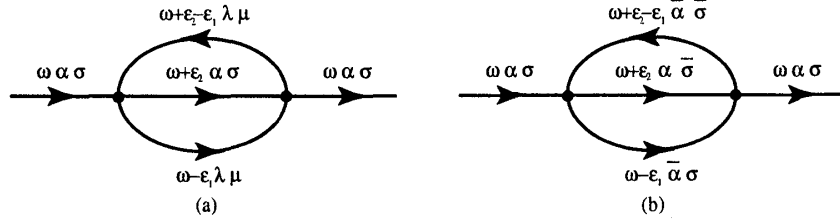
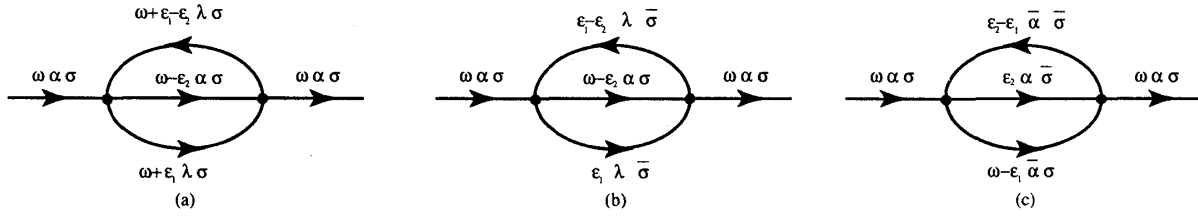


図 3.1: 式 (3.28)

これとの類推からすぐに  $\omega$  についての微分も同様の関係式が成り立つことがわかる。自己エネルギー内のすべてのグリーン関数に外部振動数  $\omega$  を挿入し（閉じたループには自由にこれが可能である（図 3.2））微分すると、

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\omega)}{\partial \omega} = i \int d\nu \sum_{\mu\lambda} [G_{\mu}^{\lambda}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, \nu, \omega, \nu) + \frac{1}{\pi} \sum_{\mu\lambda} [\text{Im} G_{\mu}^{\lambda}(0^+)] \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, 0^+, \omega, 0^+) \quad (3.29)$$

が成り立つ。第二項はグリーン関数に  $\omega = 0$  で飛びがあるための寄与である ( $-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mu}^{\lambda}(0^+) = \rho_{F\mu}^{\lambda}$ )。


 図 3.2: 2 次のダイアグラムの例。全ての内線に  $\omega$  を挿入する。

 図 3.3: 2 次のダイアグラムの例。(a)(b) 外線と同じスピンの内線に  $\omega$  を挿入する。(c) 交換項からくるダイアグラム。この時は外線と軌道は異なるがスピンは同じ内線に  $\omega$  を挿入する。

また、閉じたループを同じスピンを持つようにも構成できる (図 3.3)。この時は外線のスピンの同じスピンの内線に外部振動数  $\omega$  を挿入することができて、

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\omega)}{\partial \omega} = i \int d\nu \sum_{\lambda} [G_{\sigma}^{\lambda}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, \nu, \omega, \nu) + \frac{1}{\pi} \sum_{\lambda} [\text{Im} G_{\sigma}^{\lambda}(0^+)] \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(\omega, 0^+, \omega, 0^+) \quad (3.30)$$

となる。さらに、閉じたループを同じ軌道の指標を持つようにもできる (図 3.4)。このときは外線の軌道の指標と同じ内線に外部振動数  $\omega$  を挿入することができて、

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\omega)}{\partial \omega} = i \int d\nu \sum_{\mu} [G_{\mu}^{\alpha}(\nu)]^2 \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(\omega, \nu, \omega, \nu) + \frac{1}{\pi} \sum_{\mu} [\text{Im} G_{\mu}^{\alpha}(0^+)] \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(\omega, 0^+, \omega, 0^+) \quad (3.31)$$

も成り立つ。(3.28) を使い、 $\omega \rightarrow 0$  にすると (3.29)(3.30)(3.31) は

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial \omega} = - \sum_{\mu\lambda} \rho_{F\mu}^{\lambda} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(0,0,0,0) + \sum_{\mu\lambda} \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial h_{\mu}^{\lambda}} \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial \omega} = - \sum_{\lambda} \rho_{F\sigma}^{\lambda} \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\lambda\alpha\lambda}(0,0,0,0) + \sum_{\lambda} \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial h_{\sigma}^{\lambda}} \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial \omega} = - \sum_{\mu} \rho_{F\mu}^{\alpha} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(0,0,0,0) + \sum_{\mu} \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial h_{\mu}^{\alpha}} \quad (3.34)$$

と書ける。また、(3.32) から (3.33)(3.34) を差し引いて、

$$\frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial \omega} = -\rho_{F\sigma}^{\alpha} \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(0,0,0,0) + \rho_{F\bar{\sigma}}^{\bar{\alpha}} \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\bar{\alpha}\bar{\alpha}\bar{\alpha}\bar{\alpha}}(0,0,0,0) + \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial h_{\sigma}^{\alpha}} - \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(0,0)}{\partial h_{\bar{\sigma}}^{\bar{\alpha}}} \quad (3.35)$$

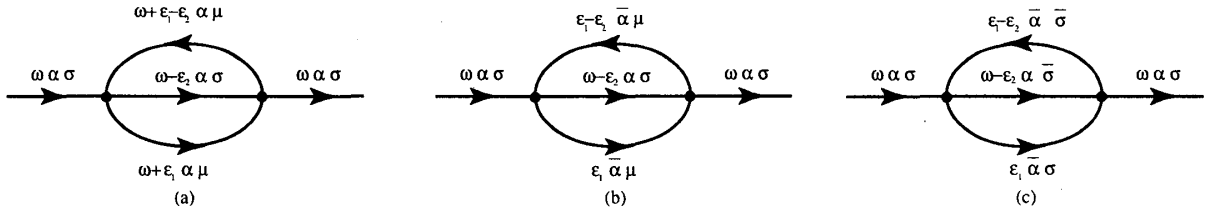


図 3.4: 2 次のダイアグラムの例。(a)(b) 外線と同じ軌道の内線に  $\omega$  を挿入する。(c) 交換項からくるダイアグラム。この時は外線とスピンは異なるが軌道は同じ内線に  $\omega$  を挿入する。

という関係がある。ここで  $h_\mu^\lambda = 0$  ということも明示するために  $\Sigma_\sigma^\alpha(0,0)$  と書いている。又、パウリの排他律から  $\Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(0,0,0,0) = 0$  である。(3.16) を (3.33)(3.34)(3.35) を用いて表す。(3.16) は

$$\begin{aligned}
 2\chi_{s(c)}^\alpha \rho_F^{\alpha-1} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\sigma} \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \pm \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\beta\sigma} \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \pm \sum_{\sigma} \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\alpha} + \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^{\bar{\alpha}}} \right) \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \left\{ \left( \sum_{\beta} \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\beta} \right) \pm \left( \sum_{\sigma'} \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_{\sigma'}^\alpha} \right) \pm \left( -\frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^\alpha} + \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \delta h_\sigma^{\bar{\alpha}}} \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

と書けるので、(3.36) の第一項は (3.33)、第二項は (3.34) そして第三項は (3.35) を用いて書き直すと次のように表される。

$$\begin{aligned}
 2\chi_{s(c)}^\alpha \rho_F^{\alpha-1} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \left\{ \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \omega} - \frac{1}{\pi} [\text{Im} G_\sigma^{\bar{\alpha}}(0)] \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) \right. \\
 &\quad \pm \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \omega} - \frac{1}{\pi} [\text{Im} G_\sigma^\alpha(0)] \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(0,0,0,0) \right) \\
 &\quad \left. \pm \left( -\frac{\partial \Sigma_\sigma^\alpha(0,0)}{\partial \omega} - \frac{1}{\pi} [\text{Im} G_\sigma^{\bar{\alpha}}(0)] \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

よって、

$$\chi_s^\alpha = \frac{\rho_F^\alpha}{2} \left( z_\alpha^{-1} + \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} - \tilde{\Gamma}_a^{\alpha\bar{\alpha}} \right) \tag{3.38}$$

$$\chi_c^\alpha = \frac{\rho_F^\alpha}{2} \left( z_\alpha^{-1} - \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} - \tilde{\Gamma}_s^{\alpha\bar{\alpha}} \right) \tag{3.39}$$

と表せる。ここで、

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} = \rho_F^\alpha \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha\alpha\alpha}(0,0,0,0) \tag{3.40}$$

$$\tilde{\Gamma}_s^{\alpha\bar{\alpha}} = \rho_F^{\bar{\alpha}} \left( \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) + \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) \right) \tag{3.41}$$

$$\tilde{\Gamma}_a^{\alpha\bar{\alpha}} = \rho_F^{\bar{\alpha}} \left( \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) - \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\bar{\alpha}\alpha\bar{\alpha}}(0,0,0,0) \right) \tag{3.42}$$

$$G_\sigma^\alpha(0) = G_{\bar{\sigma}}^\alpha(0) \tag{3.43}$$

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} = \tilde{\Gamma}_{\bar{\sigma}\sigma}^{\alpha\alpha} \tag{3.44}$$

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{\alpha\bar{\alpha}} = \tilde{\Gamma}_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'}^{\alpha\bar{\alpha}} \tag{3.45}$$

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{\alpha\bar{\alpha}} = \tilde{\Gamma}_{\sigma'\sigma}^{\bar{\alpha}\alpha} \tag{3.46}$$

を用いた。また、2×(3.34)−(3.32)を使うと、軌道感受率は(3.18)より、

$$\begin{aligned}
 2\chi_{\sigma}^{\text{orb}} &= \left[ \frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow} + \rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} - \frac{1}{2} \left( \rho_{F\sigma}^{\uparrow} \sum_{\sigma'\beta} \beta \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\uparrow}(0,0)}{\partial h_{\sigma'}^{\beta}} - \rho_{F\sigma}^{\downarrow} \sum_{\sigma'\beta} \beta \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\downarrow}(0,0)}{\partial h_{\sigma'}^{\beta}} \right) \right] \\
 &= \left[ \frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow} + \rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} - \frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow}}{2} \left( 2 \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\uparrow}(0,0)}{\partial \omega} + 2 \sum_{\mu} \rho_{F\mu}^{\uparrow} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}(0,0,0,0) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\uparrow}(0,0)}{\partial \omega} - \sum_{\mu\lambda} \rho_{F\mu}^{\lambda} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\uparrow\lambda\uparrow\lambda}(0,0,0,0) \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} \sum_{\sigma'} \left( -2 \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\downarrow}(0,0)}{\partial \omega} - 2 \sum_{\mu} \rho_{F\mu}^{\downarrow} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}(0,0,0,0) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{\partial \Sigma_{\sigma}^{\downarrow}(0,0)}{\partial \omega} + \sum_{\mu\lambda} \rho_{F\mu}^{\lambda} \Gamma_{\sigma\mu\sigma\mu}^{\downarrow\lambda\downarrow\lambda}(0,0,0,0) \right) \right] \\
 &= \frac{\rho_{F\sigma}^{\uparrow}}{2} \left( z^{\uparrow-1} - \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\uparrow\uparrow} + \tilde{\Gamma}_s^{\uparrow\uparrow} \right) + \frac{\rho_{F\sigma}^{\downarrow}}{2} \left( z^{\downarrow-1} - \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\downarrow\downarrow} + \tilde{\Gamma}_s^{\downarrow\downarrow} \right) \quad (3.47)
 \end{aligned}$$

となる。もし、各軌道の電荷感受率と軌道感受率が抑えられた領域を考えれば、

$$z_{\alpha}^{-1} = \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} \quad (3.48)$$

$$\tilde{\Gamma}_s^{\alpha\bar{\alpha}} = 0 \quad (3.49)$$

が成立することがわかる。この時に独立な量は、 $z_{\alpha}$ と $\tilde{\Gamma}_a^{\alpha\bar{\alpha}}$ であり、一軌道の場合と異なり系の性質は $z \sim T_K$ だけではスケールされない。



## 第4章 解析結果

### 4.1 繰り込み因子と準粒子間相互作用

比熱の表式を NRG(2.31) と LFL(3.11) で比較すると繰り込み因子  $z_\alpha$  は次のように書ける ( $\rho_F^\alpha$  はバンド幅  $D$  で無次元化されているものとする)。

$$z_\alpha = \rho_F^\alpha \frac{A_\Lambda}{\tilde{t}_\alpha \phi(K_\alpha)} \quad (4.1)$$

(2.32) と (3.38)、(2.33) と (3.39) を比較するとバーテックスは次のように書けることがわかる。

$$\rho_F^\alpha \tilde{\Gamma}_{\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha} = \tilde{U}_\alpha \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{4} \left[ \frac{\phi(K_\alpha)}{A_\Lambda} \right]^2 \quad (4.2)$$

$$\rho_F^\alpha \tilde{\Gamma}_s^{\alpha\bar{\alpha}} = \tilde{U}_{AB} \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4} \frac{\phi(K_A)\phi(K_B)}{A_\Lambda^2} \quad (4.3)$$

$$\rho_F^\alpha \tilde{\Gamma}_a^{\alpha\bar{\alpha}} = \frac{\tilde{J}_z}{4} \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4} \frac{\phi(K_A)\phi(K_B)}{A_\Lambda^2} \quad (4.4)$$

準粒子間相互作用はこれらに  $z_\alpha z_\beta$  を乗じたものである。よって、準粒子間相互作用  $F's$  (状態密度をかけると不純物問題におけるランダウパラメータに対応する) は

$$F_a^{\alpha\alpha} \equiv z_\alpha^2 \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\alpha\alpha\alpha\alpha} = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{4} \frac{\tilde{U}_\alpha}{\tilde{t}_\alpha^2} \quad (4.5)$$

$$F_s^{AB} \equiv z_A z_B \left[ \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{ABAB} + \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{ABAB} \right] = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4} \frac{\tilde{U}_{AB}}{\tilde{t}_A \tilde{t}_B} \quad (4.6)$$

$$F_a^{AB} \equiv z_A z_B \left[ \Gamma_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{ABAB} - \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{ABAB} \right] = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4} \frac{\tilde{J}_z/4}{\tilde{t}_A \tilde{t}_B} \quad (4.7)$$

$$F_{\text{ex}}^{AB} \equiv z_A z_B \Gamma_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{ABAB} = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{4} \frac{\tilde{J}_\pm/2}{\tilde{t}_A \tilde{t}_B} \quad (4.8)$$

という形になる。(4.8) は (4.7) との類推から定義した。ただし本当の意味での準粒子間相互作用  $F_{\text{ex}}^{AB}$  が (4.8) で書けるかどうかは明白ではない。なぜなら、LFL で帯磁率の横成分を求めると、インコヒーレント部分の寄与が残り、 $z$  成分のように NRG との対応関係が見つからないからである。またバーテックス部分は全ての振動数を 0 (フェルミ面上) としたものである。(4.6)(4.7)(4.8) の係数は

$$U_{\sigma_1\sigma_3}^{\sigma_2\sigma_4} \psi_{\sigma_1}^A \psi_{\sigma_3}^A \psi_{\sigma_2}^B \psi_{\sigma_4}^B = \frac{U_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} + U_{\uparrow\uparrow}^{\downarrow\downarrow}}{2} N^A N^B + 2(U_{\uparrow\uparrow}^{\uparrow\uparrow} - U_{\uparrow\uparrow}^{\downarrow\downarrow}) S_z^A S_z^B + U_{\uparrow\downarrow}^{\uparrow\downarrow} (S_+^A S_-^B + S_-^A S_+^B)$$

と書けることからくる。ここで  $U$  は異軌道間準粒子相互作用で、 $\psi, N, S$  は準粒子の消滅演算子、各軌道の全粒子数、スピン演算子である。以下に種々のパラメータにおいて  $z_\alpha$  と  $F's$  を計算した結果を示す。 $\rho_F^\alpha$  は計算することも可能であるが [15]、本研究では計算時間の短縮のため有効質量

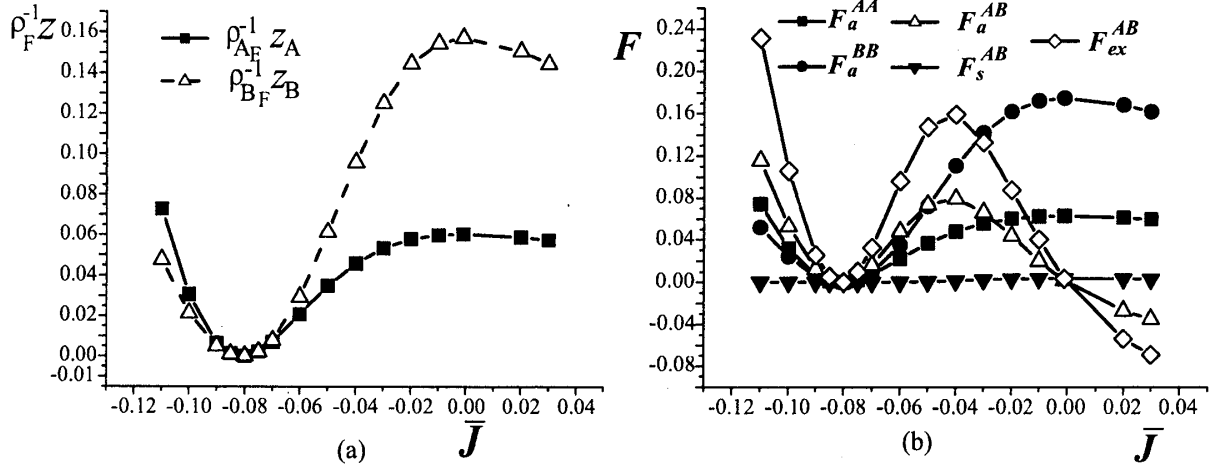


図 4.1: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  v.s.  $J$ . (b) 準粒子間相互作用 v.s.  $J$ . フント結合が等方的な場合。パラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.3$ 。また、 $\bar{U}_{AB} = 0.0$ ,  $\bar{J} = 0.0$  とした時の近藤温度  $T_K^\alpha \equiv 1/\chi_s^\alpha$  は  $T_K^A = 1.075\text{E-}2$ ,  $T_K^B = 1.813\text{E-}2$  である。

に比例した形で求めるにとどめる ( $z_\alpha / \rho_F^\alpha \propto 1/m_\alpha^*$ )。

#### 等方的フントの場合

図 4.1(a) は  $f^2$  の結晶場準位の励起状態の二重項  $\Gamma_5$  と一重項  $\Gamma_3$  が縮退している場合の  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  と、図 4.1(b) はランダウパラメータ  $\bar{J} (\bar{J}_z = \bar{J}_\pm)$  のグラフである。臨界点は  $\bar{J}_c = 0.81\dots$  であり、 $z_\alpha / \rho_F^\alpha \sim |\bar{J} - \bar{J}_c|^2$  で 0 になる。このことは二不純物近藤模型での結果と同様である [11]。  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  は、励起状態のエネルギーを高くしていくと ( $J$  を 0 から負に大きくしていく)、臨海点へ向かって単調減少する。また臨界点に近づく手前で、異軌道間の準粒子相互作用  $F_a^{AB}$ ,  $F_{ex}^{AB}$  がピークを持ち、同軌道間のそれに比べて大きくなる領域がある (図 4.1(b))。  $\bar{J} = 0$  では独立な二つの不純物模型となるので  $F_{a(ex)}^{AB} = 0$  である。(3.49) で見たように、 $F_s^{AB} \sim 0$  も確認できる。図 4.2 は図 4.1 と同じパラメータにおけるウィルソン比である。  $R_A, R_B$  は各々の軌道のみの  $\tilde{t}_\alpha, \tilde{U}_\alpha$  から計算したウィルソン比である。臨界点で  $R \sim 0$  だが、  $R_A, R_B$  はほとんど変化を示さずに  $\sim 2$  となっている。このことはすなはち  $z_\alpha^2 \Gamma_a^{\alpha\alpha} \sim z_\alpha \sim T_{K_\alpha}$  であり、  $\bar{J}$  だけが大きく変化することを示す ( $R_A + R_B \neq R$ )。このことも二不純物近藤模型の場合と同じである [11]。

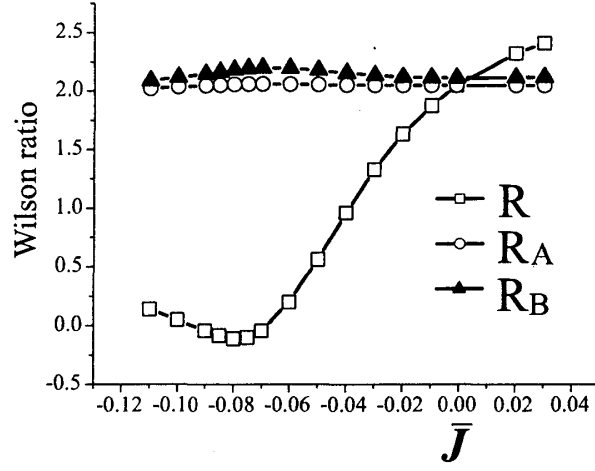


図 4.2: ウィルソン比  $R, R_A, R_B$ 。ここで  $R_\alpha$  は  $\bar{\alpha}$  軌道の寄与を除いた時のウィルソン比である。パラメータは図 4.1 と同じである。

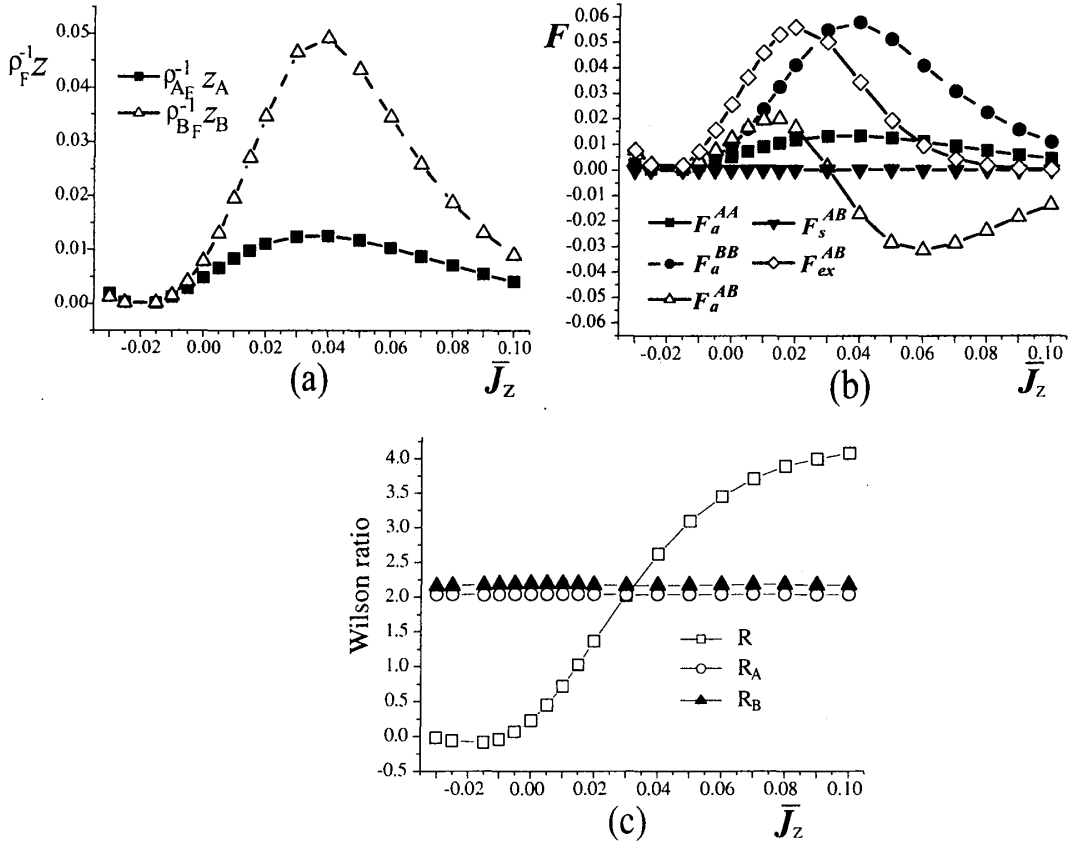


図 4.3: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  vs  $\bar{J}_z$  (b)  $F$  vs  $\bar{J}_z$  (c) ウィルソン比 vs  $\bar{J}_z$ 。 (a)(b)(c) ともパラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.25$ ,  $\bar{J}_\pm = -0.04$ 。臨界点  $\bar{J}_z^c \sim -0.02$ 。

### 異方的フントの場合

図 4.3(a)(b) は  $f^2$  の結晶場準位の励起状態の二重項  $\Gamma_5$  と一重項  $\Gamma_3$  が分裂している場合の  $z_\alpha/\rho_F^\alpha, F$  と  $\bar{J}_z(\bar{J}_\pm = \text{const.})$  のグラフである。臨界点は  $\bar{J}_z \sim -0.02$  である。励起状態  $\Gamma_5$  と  $\Gamma_3$  が  $\Gamma_4$  と縮退している場合が  $\bar{J}_z = -\bar{J}_\pm = 0.04$  の点である。その点で有効質量は最も軽く (図 4.3(a))、励起状態のエネルギーを高くしていくと、単調に減少する。この振る舞いは等方的な場合と同じである。 $F_{a(\text{ex})}^{AB}$  は異方性を反映しているが、臨界点に達する前に極大値を取ることは等方的な時と同様である。また臨界点手前では  $F_{a(\text{ex})}^{AB} > F_a^{\alpha\alpha}$  となっている。 $\bar{J}_z > 0.04 (= -\bar{J}_\pm)$  の時は、 $\Gamma_5$  二重項が基底状態となる領域である。 $\bar{J}_z$  を大きくしていくと  $S = 1$  の 2 チャンネル近藤模型に漸近していくので、 $F_{\text{ex}}^{AB}$  は急激に小さくなる。また、 $F_a^{AB} < 0$  もそのことと合致する。ウィルソン比に関しては等方的な場合と同じく、独立な寄与  $R_\alpha \sim 2$  であるが、全体としては臨界点で  $R \sim 0$  となる (図 4.3(c))。

図 4.4 図 4.5 は、他のパラメータは図 4.3 と同じまま、混成の大きさを変化させた場合の  $z_\alpha/\rho_F^\alpha, F$  と  $\bar{J}_z(\bar{J}_\pm = \text{const.})$  のグラフである。 $v_\alpha$  を小さくしていくと (つまり近藤温度を小さくしていく)、臨界点が  $\bar{J}_z^c \rightarrow \bar{J}_\pm$  となる。更に小さくすると、 $\bar{J}_z^c > -\bar{J}_\pm$  にもなる。 $\bar{J}_z, \bar{J}_\pm$  のピークの構造は大きくは変化しない。

図 4.6 図 4.7 は  $v_\alpha$  を一定に保った時の、 $z_\alpha/\rho_F^\alpha, F$  と  $\bar{J}_z(\bar{J}_\pm = \text{const.})$  のグラフである。基底状態の一重項  $\Gamma_4$  と励起状態の一重項  $\Gamma_3$  の間隔を一定にして、励起状態の  $\Gamma_5$  の準位を図 4.4 図 4.6 図 4.7 で変化させている。実際には  $\bar{J}_z$  を変化させると  $f^2$  の全ての状態の準位が変化を受ける。 $\bar{U}_{AB}$  を変化させることで  $\Gamma_3, \Gamma_4$  の準位を一定にすることができるが、 $\bar{U}_{AB}$  の変化による準粒子相互作用定数と繰り込み因子の変化はほとんど無視できることからここでは  $\bar{U}_{AB}$  も一定で計算している。

図 4.3 – 図 4.7 の横軸を  $(\bar{J}_z - \bar{J}_z^c)/\Delta_c = -(\Delta - \Delta_c)/\Delta_c$  に、準粒子間相互作用を  $\bar{J}_z = -\bar{J}_\pm$  の値で規格化したものを図 4.8 に示す。全てのパラメータの線が一本の線に良く乗っていることがわかる。ただし、臨界点から離れると一本にまとまらない。このことが数値誤差なのか本質的にそうなのかはここでは明確に示すことはできなかった。臨界点付近ではやはり  $F_{a(\text{ex})}^{\alpha\beta} \sim (\Delta - \Delta_c)^2$  となっている。ここでは  $\bar{J}_\pm$  を一定に保って  $\bar{J}_z$  を変化させた場合であるので、図 4.1 の線はこのようにスケールされない。また  $(\bar{J}_z, \bar{J}_\pm)$  を様々な方向から変化させた結果は定性的に図 4.8 と同じである。つまり、二重項  $\Gamma_5$  が一重項  $\Gamma_4$  よりエネルギーが高い時に、近藤一重項側から臨界点に近づけると、 $F_a^{\alpha\alpha}$  は単調に減少し  $F_{a(\text{ex})}^{AB}$  は極大値を取る、という振る舞いである。

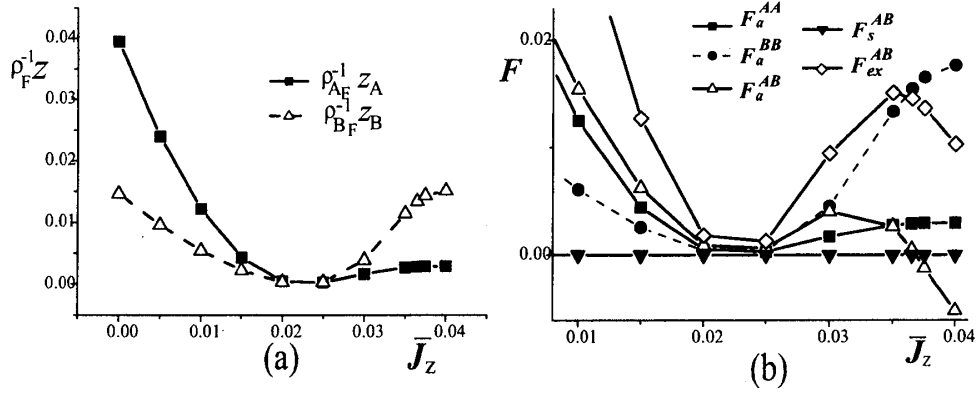


図 4.4: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  vs  $\bar{J}_z$  (b)  $F$  vs  $\bar{J}_z$ . (a)(b) ともパラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.22$   $\bar{J}_\pm = -0.04$ . 臨界点  $\bar{J}_z^c \sim 0.022$

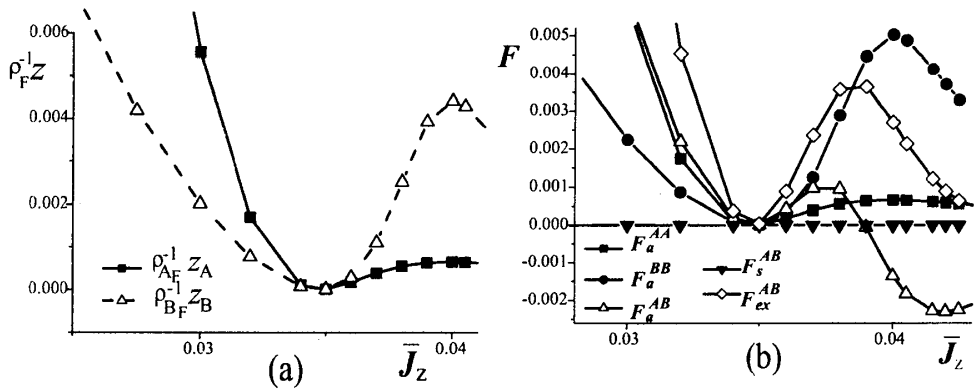


図 4.5: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  vs  $\bar{J}_z$  (b)  $F$  vs  $\bar{J}_z$ . (a)(b) ともパラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.20$   $\bar{J}_\pm = -0.04$ . 臨界点  $\bar{J}_z^c \sim 0.035$

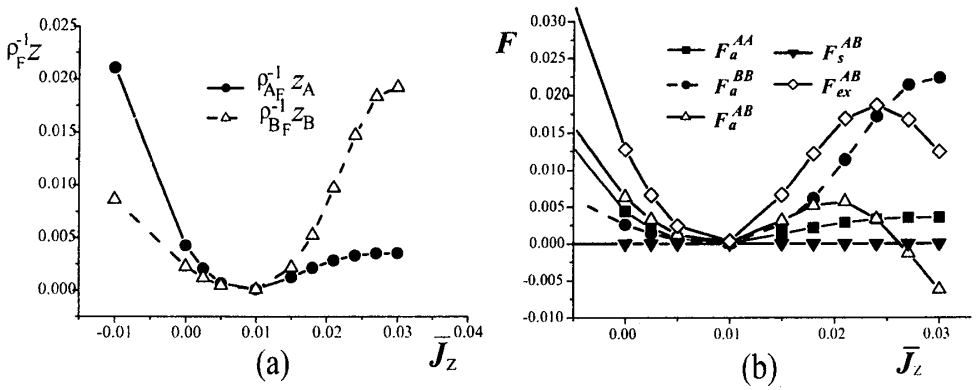


図 4.6: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  vs  $\bar{J}_z$  (b)  $F$  vs  $\bar{J}_z$ . (a)(b) ともパラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.22$   $\bar{J}_\pm = -0.03$ . 臨界点  $\bar{J}_z^c \sim 0.007$

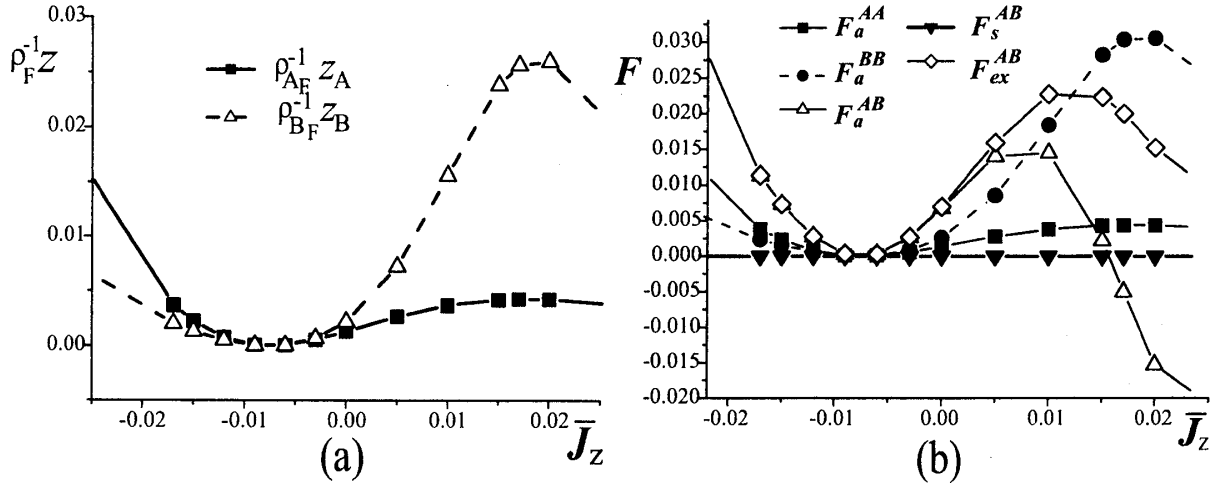


図 4.7: (a)  $z_\alpha / \rho_F^\alpha$  vs  $\bar{J}_z$  (b)  $F$  vs  $\bar{J}_z$ 。 (a)(b) ともパラメータは  $\bar{\epsilon}_A = -0.6$ ,  $\bar{\epsilon}_B = -0.5$ ,  $\bar{U}_A = \bar{U}_B = 2.0$ ,  $\bar{U}_{AB} = 0.4$ ,  $v_A = v_B = 0.22$   $\bar{J}_\pm = -0.02$ 。 臨界点  $\bar{J}_z^c \sim -0.008$

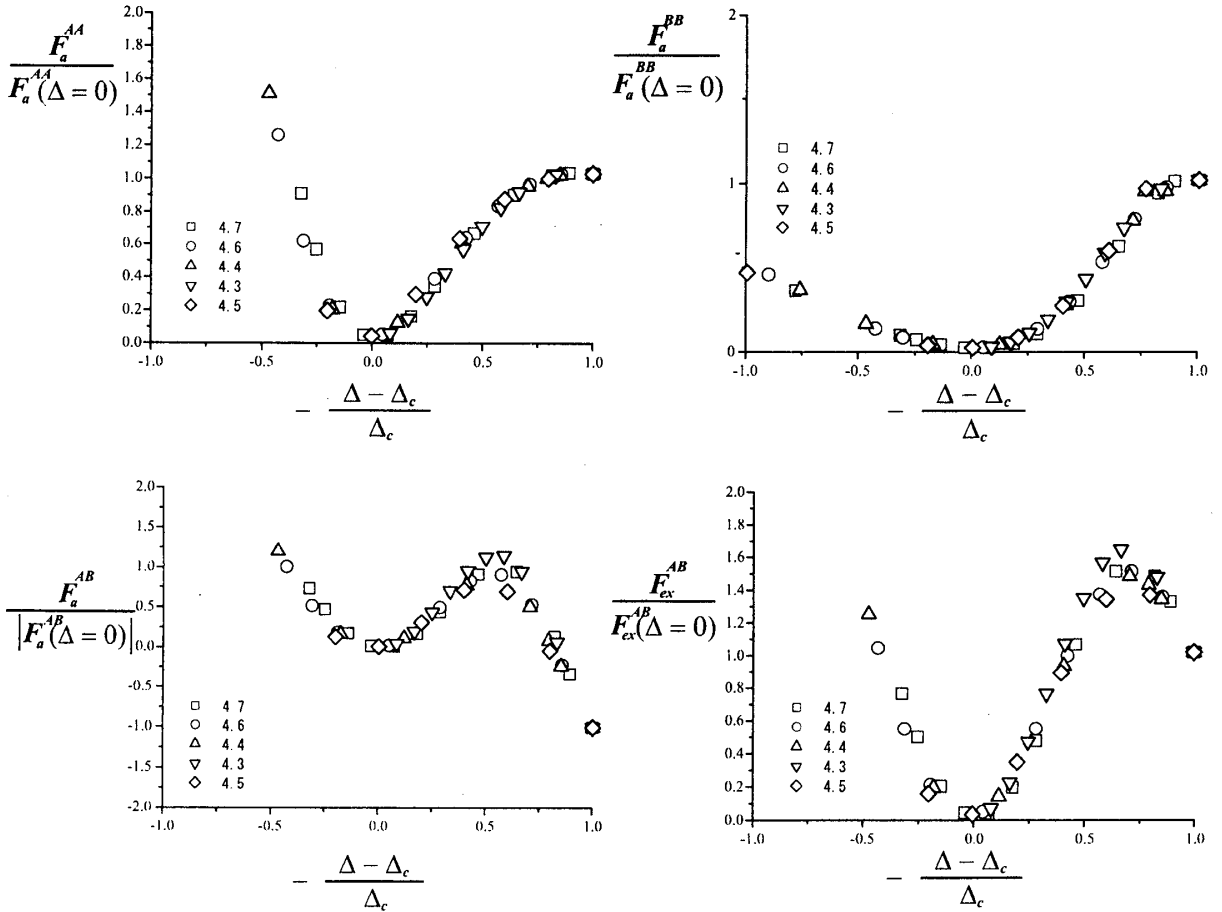


図 4.8: 図 4.3 – 図 4.7 それぞれをスケールしなおした時の準粒子間相互作用。

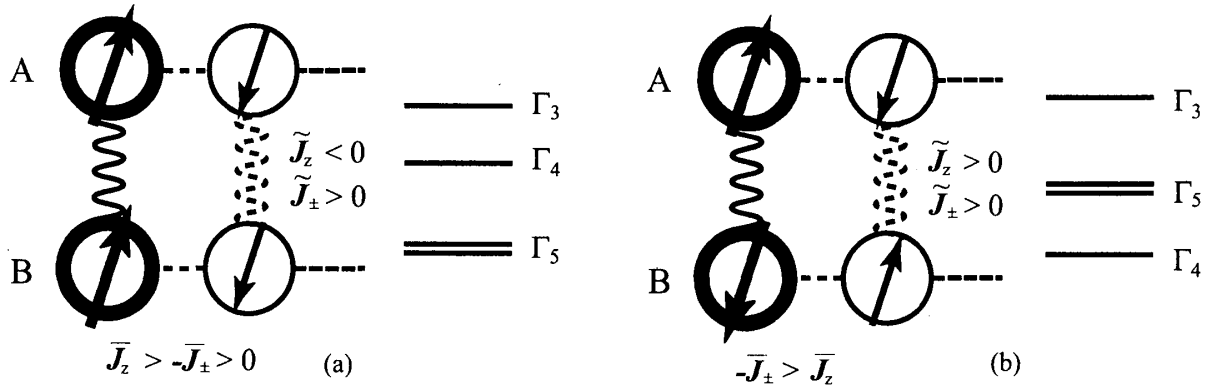


図 4.9: 異軌道間相互作用が  $f^2$  結晶場準位とともに大きく変化することの描像。(a) 二重項が結晶場基底状態の場合。(b) 一重項が結晶場基底状態の場合。

ここまで見てきたように、同軌道間の相互作用  $F_a^{\alpha\alpha}$  は励起状態の準位を上げていくと、単調に減少するが、異軌道間のそれはどのパラメータにおいても繰り込み因子が 0 になる臨界点に達する前に極大を示す。このことは次のように解釈できる。

$\bar{J}_z > -\bar{J}_\pm > 0$  の場合：

この時、不純物サイトの  $f$  電子は強磁性的な状態が支配的である (図 4.9(a))。このことと伝導電子と  $f$  電子の間に働く近藤効果を考えると、 $f$  電子と混成する伝導電子には仮想的な不純物サイトへのホッピングにより、強磁性的な相互作用が生じる事がわかる。

$-\bar{J}_\pm > \bar{J}_z$  の場合：

この時、不純物サイトの  $f$  電子は反強磁性的な状態が支配的である (図 4.9(b))。このことと伝導電子と  $f$  電子の間に働く近藤効果を考えると、 $f$  電子と混成する伝導電子 ( $f_0$  サイト) には仮想的な不純物サイトへのホッピングにより、反強磁性的な相互作用が生じる事がわかる。仮想的なホッピングを考えれば、この相互作用の大きさは不純物サイトの反強磁性を安定化すればするほど増大するのは明白である。つまり、 $\bar{J}_z < 0 \rightarrow \bar{J}_z > 0, \bar{J}_\pm \rightarrow \text{大}$ 、となる。ただし特別なことは、ある  $\bar{J}_z, \bar{J}_\pm$  において、この系が非フェルミ液体の固定点を持つことである。そこでは準粒子描像が破綻し、従って  $z_\alpha \rightarrow 0$  となる。準粒子間相互作用は  $z_\alpha z_\beta \Gamma_{a(\text{ex})}^{\alpha\beta}$  なので不純物サイトの反強磁性を安定化することからくる寄与を打ち消して  $F_{a(\text{ex})}^{AB} \rightarrow 0$  となるのである。よって、この二つの寄与がちょうど拮抗する点において  $F_{a(\text{ex})}^{AB}$  は極大値を取る。

同軌道間準粒子相互作用に関しては、このような異なる軌道の  $f$  電子の相互作用に強く依存するようなことはなく、 $\bar{J}_z, \bar{J}_\pm$  にはあまり依存せず、臨界点で  $F_a^{\alpha\alpha} \rightarrow 0$  になるのは  $z_\alpha \rightarrow 0$  になることからの寄与だけである (各軌道のウィルソン比からも明らかである)。

## 4.2 擬スピンから全角運動量表示へ

以上の結果を元の角運動量表示へ戻してみる。

$$F_a^{AA} \rightarrow F_{\frac{5}{2}\frac{-5}{2}} \quad (4.9)$$

$$F_a^{BB} \rightarrow F_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} \quad (4.10)$$

$$F_a^{AB} \rightarrow [F_{\frac{5}{2}\frac{-1}{2}} - F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}}] \quad (4.11)$$

$$F_{\text{ex}}^{AB} \rightarrow F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}\frac{-5}{2}\frac{-1}{2}} \quad (4.12)$$

$$F_{\frac{5}{2}\frac{-1}{2}} \approx -F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}} \quad (4.13)$$

(4.13) は  $F_s^{AB} \sim 0$  であることからくる。また、(4.9)(4.10)(4.11) は角運動量の  $z$  成分を保存する散乱であるが、(4.12) は保存しない。これは (2.10) のように、 $f^2$  状態での  $xy$  面内での異方性のパラメータを  $f$  電子の相互作用の形にして取り込んだためである (異軌道間相互作用の形で取り込むことは必ずしも必要ではない。 $f^2$  状態での準位を再現すれば準粒子はそれを感じて (4.12) の形の相互作用をすることになる)。また、(4.12) が最も大きく増強されることは注目すべき点である。本研究の結果を考慮すると

$$F_{\text{ex}}^{AB} > \max(F_{\frac{5}{2}\frac{-5}{2}}, F_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}}) > F_{\frac{5}{2}\frac{-1}{2}} \sim -F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}} > \min(F_{\frac{5}{2}\frac{-5}{2}}, F_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}}) \quad (4.14)$$

という関係が見られる。準粒子間の相互作用を格子模型について、大まかに見積もると最低次の相互作用で図 4.10 のようなものが存在する。これらの寄与により

$$V_{\frac{5}{2}\frac{5}{2}}^{\text{eff}}(\mathbf{q}) \approx -(F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}}^2 + F_{\frac{5}{2}\frac{-1}{2}}^2) \chi_{\frac{1}{2}(\frac{-1}{2})}(\mathbf{q}) \quad (4.15)$$

$$V_{\frac{5}{2}\frac{-5}{2}}^{\text{eff}}(\mathbf{q}) \approx F_{\frac{5}{2}\frac{-5}{2}} - 2F_{\frac{5}{2}\frac{1}{2}}F_{\frac{5}{2}\frac{-1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}(\frac{-1}{2})}(\mathbf{q}) \quad (4.16)$$

ここで  $\chi_{\frac{1}{2}(\frac{-1}{2})}(\mathbf{q})$  は  $j_z = \pm \frac{1}{2}$  の準粒子のバブルである。(4.13) より (4.15) は引力的で (4.16) は斥力的な相互作用になることがわかる。これらを用いて  $f^2$  系の格子模型の有効ハミルトニアンを構成し解析することは今後の課題としたい。

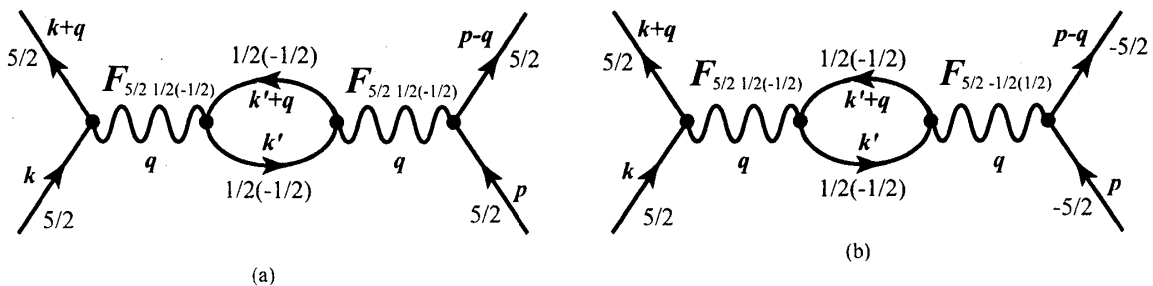


図 4.10: (a)  $\frac{5}{2}\frac{5}{2}$  の相互作用。(b)  $\frac{5}{2}\frac{-5}{2}$  の相互作用。



## 第5章 まとめと今後の展望

本研究で得られた結果をまとめると次のようになる。

結晶場一重項基底状態を仮定した時の  $f^2$  不純物アンダーソン模型を数値繰り込み群を用いて解析した。裸の相互作用定数は、同軌道間のクーロン斥力が異軌道間のクーロン斥力、交換相互作用に対して十分に大きいにもかかわらず、非フェルミ液体の臨界点との兼ね合いにおいて、低温で形成される準粒子間相互作用の大きさが、同軌道間のもの ( $F_a^{\alpha\alpha}$ ) に比べて異軌道間のもの ( $F_a^{\alpha\bar{\alpha}}, F_{\text{ex}}^{\alpha\bar{\alpha}}$ ) が強く増強されることがわかった。またその異軌道間相互作用は  $f^2$  状態の結晶場分裂が起源となっている相互作用である。

このことは、低温での有効的な格子模型を構成するための出発点となると思われる。つまり、準粒子は裸のバンド幅に繰り込み因子を乗じた程度の有効的なバンドと相互作用定数を持つが、 $f^2$  の問題においては、 $f^2$  準位が誘起する異軌道間相互作用 (必ずしも回転対称性はない) が、結晶場の大きさにより増強される領域が重要になってくるとと思われる。

### 今後の問題点

- 本研究では  $f^2$  状態の結晶場準位を  $J = 5/2$  の3つに分裂した  $f^1$  状態のうち二つしか用いなかった。このため、 $f^2$  準位の二重項 ( $\Gamma_5$ ) の全角運動量は  $J = 4$  と  $J = 2$  が混ざったものになっていた。 $U$  系を念頭におくと  $f^2$  状態は、フントの規則から  $J = 4$  のヒルベルト空間だけを考えて良いというのが一般的である。 $J = 4$  の状態を構成するためには、使用していなかった  $j_z = \pm 3/2$  の状態を含めなければいけない。また、このことで本研究で得られた結果がどの程度影響を受けるかというのは未確認の課題である。
- $f^2$  状態の結晶場準位を表す際に、直接の計算には用いていない  $J = \frac{7}{2}$  の状態の効果で  $f^2$  状態の一重項を再現した。 $J = \frac{5}{2}$  だけを用いる模型において、どのように  $f^2$  状態の  $J = \frac{7}{2}$  の成分を取り込むか、という問題はさらなる議論が必要であると思われる。
- 有効的な格子模型を構成する出発点となると書いたが、どのような模型を仮定すれば、実際に実験で報告されている物性を再現できるかという問題は今後の課題である。4.2節では大まかな見積もりをしたが、超伝導揺らぎに  $F_{\text{ex}}^{AB}$  が効いてくる可能性もある。局所近似での (揺らぎの波数依存性を無視した)  $f^2$  系物質の超伝導が [26] で議論されている。そこでは裸のクーロン相互作用からの RPA を用いた議論であるが、本研究の結果を用いて議論することもできると期待する。

## 付録A 演算子のN積

付録Aにおいては、 $f_{0\mu}, f_{1\mu}, A_{1\mu}$ などで表された演算子 $\hat{O}_i$ を自由電子の基底 $g_{i\mu}, h_{i\mu}$ のN積の形で表す詳細を述べる。N積にする理由は1.1で述べたように、NRGでは各ステップの基底エネルギーを差し引いているためである。N積にしておくと、このようなあいまいな一定のエネルギー項を考えなくても良くなる。ここでの表記は二軌道の場合を取る。 $\hat{O}_{1\alpha}$ については自明なので、電子性孔対称性がない場合に[3]に間違いのあった $\hat{O}_{2\alpha}$ から説明する。基本となるのは

$$f_{0\alpha\mu}^\dagger f_{0\alpha\mu} - 1 \quad (\text{A.1})$$

という形である（ここでもスピンについての和は取られているものとする）。この形は電子正孔変換(1.94)に対し符号をかえる。(1.120)を代入すると、(A.1)は次のようになる。

$$\begin{aligned} f_{0\alpha\mu}^\dagger f_{0\alpha\mu} - 1 &= \Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{ij} \left[ \alpha_{\alpha i}^+ \alpha_{\alpha j}^+ g_{\alpha i\mu}^\dagger g_{\alpha j\mu} + \bar{\mu} \alpha_{\alpha i}^+ \alpha_{\alpha j}^- g_{\alpha i\mu}^\dagger h_{\alpha j\bar{\mu}}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \bar{\mu} \alpha_{\alpha i}^- \alpha_{\alpha j}^+ h_{\alpha i\bar{\mu}} g_{\alpha j\mu} - \alpha_{\alpha i}^- \alpha_{\alpha j}^- h_{\alpha i\bar{\mu}}^\dagger h_{\alpha j\bar{\mu}} \right] \\ &\quad + \left[ 2\Lambda^{-(N-1)/2} \left( \sum_{i=1}^{(N+1)/2} \alpha_{\alpha i}^{-2} \right) - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

(A.2)の第一項を $\mathcal{N}_\alpha$ 、第二項を $\mathcal{A}_\alpha$ と定義する。電子正孔対称性がある時は $\mathcal{A}_\alpha = 0$ である。 $\{f\} \rightarrow \{g, h\}$ への変換がユニタリであることから、

$$\Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{\alpha i}^{+2} + \alpha_{\alpha i}^{-2}) = 1 \quad (\text{A.3})$$

は厳密に成り立つ。(A.3)を用いて、 $\mathcal{A}_\alpha$ は次のようにも書ける。

$$\mathcal{A}_\alpha = -\Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{\alpha i}^{+2} - \alpha_{\alpha i}^{-2}) \quad (\text{A.4})$$

$\hat{O}_{2\alpha}$ は

$$\begin{aligned} \hat{O}_{2\alpha} &= (\mathcal{N}_\alpha + \mathcal{A}_\alpha)^2 \\ &= \mathcal{N}_\alpha \mathcal{N}_\alpha + 2\mathcal{A}_\alpha \mathcal{N}_\alpha + \mathcal{A}_\alpha \mathcal{A}_\alpha \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

(A.5)の第三項は純粋に定数であるのでNRGでは考えなくても良い。第一項は非常に長い初等的な計算から

- $g^\dagger g^\dagger g g, h^\dagger h^\dagger h h, g^\dagger g^\dagger h^\dagger h^\dagger, \dots$ 等の演算子四個の項。
- $-\mathcal{A}_\alpha \mathcal{N}_\alpha$ という項。

• const.

の三種類の項が出てくる。明らかに3つ目の一定の項は無視できる。二つ目の項と (A.5) の第二項を合わせ、演算子四個の項を合わせたのが (1.132) の最初の二項である。ここで  $\mathcal{A}_\alpha$  と  $C_2$  の関係を示さなければいけない。(1.122)-(1.125) によれば大きい  $i$  について  $\alpha_{\alpha i}^\pm \sim \alpha_{0\alpha}(K_\alpha)\Lambda^{(i-1\pm\gamma_\alpha)/2}$  である (0 の添え字は以前のとおり省略している)。このことを用いて、程よい大きさの  $i$  を  $n$  と書いて、

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_\alpha &= -\Lambda^{-(N-1)/2} \sum_{i=1}^n (\alpha_{\alpha i}^{+2} - \alpha_{\alpha i}^{-2}) - 2 \sinh[\gamma_\alpha \ln \Lambda] \alpha_{0\alpha}^2(K_\alpha) \sum_{i=n}^{(N+1)/2} \Lambda^{i-1} \\
 &= -\Lambda^{-(N-1)/2} \left[ \sum_{i=1}^n (\alpha_{\alpha i}^{+2} - \alpha_{\alpha i}^{-2}) + \frac{2\alpha_{0\alpha}^2(K_\alpha) \sinh[\gamma_\alpha \ln \Lambda]}{1 - \Lambda} \Lambda^{n-1} \right] \\
 &\quad - \frac{2 \sinh[\gamma_\alpha \ln \Lambda] \alpha_{0\alpha}^2(K_\alpha)}{1 - \Lambda^{-1}} \\
 &\equiv C_{2\alpha} \Lambda^{-(N-1)/2} + C_{1\alpha}
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

と、 $N$  に依存する第一項と、定数の第二項に分けて書けることがわかる。 $n$  の選び方は任意性が残るが、十分に大きい  $n$  を用いれば問題にはならない。(1.130) のように RG 変換を行うことを考えれば  $\mathcal{A}_\alpha \mathcal{N}_\alpha$  の形にした時に、(A.6) の第一項  $C_{2\alpha}$  の部分は RG の固有値は  $\Lambda^{-1}$  であるが、(A.6) の第二項  $C_{1\alpha}$  の部分は固有値 1 になる。よって、この  $C_{1\alpha} \mathcal{N}_\alpha$  の項は真に固定点ハミルトニアン  $H^*$  のポテンシャル散乱に含ませることができる。このようにして (1.132) を示すことができる。

以上と同じような議論を  $\hat{O}_3$  についても適用できる。

$$\begin{aligned}
 \hat{O}_3 &= (f_{0A\mu}^\dagger f_{0A\mu} - 1)(f_{0B\mu}^\dagger f_{0B\mu} - 1) \\
 &= (\mathcal{N}_A + \mathcal{A}_A)(\mathcal{N}_B + \mathcal{A}_B) \\
 &= \mathcal{N}_A \mathcal{N}_B + \mathcal{A}_A \mathcal{N}_B + \mathcal{A}_B \mathcal{N}_A + \text{const.} \\
 &= \mathcal{N}_A \mathcal{N}_B + \Lambda^{-(N-1)/2} (C_{2A} \mathcal{N}_B + C_{2B} \mathcal{N}_A) \\
 &\quad + (C_{1A} \mathcal{N}_B + C_{1B} \mathcal{N}_A) + \text{const.}
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

同じ理由から、(A.7) の第三、四項は考えなくても良い。残りはすなはち (2.27) である。このようにして得られるポテンシャル項  $(f_0^\dagger f_0 - 1)$  は不純物サイトで伝導電子が感じるポテンシャル散乱の多体効果による補正項となっている。

$\hat{O}_4$ ,  $\hat{O}_5$  についてはこれまでのような事情はなく単純であるので、ここでは取り上げない。

## 謝辞

本研究を行うにあたり、多岐にわたる議論と御指導を頂いた三宅和正教授に深く感謝いたします。また、様々な議論の中、適切な御助言をして下さった河野浩助教授に感謝の意を表したいと思います。

本研究の物理的な事柄から、計算の詳細まで丁寧に御指導していただいた松下電器先端技術研究所の四橋聡史氏に深く感謝申し上げます。

議論の中で大変勉強になるお話を頂いた鶴田篤史氏、伏屋雄紀氏と M2 の各氏に感謝申し上げます。最後になりましたが、研究室生活を共に過ごして頂いた M1、4 年生の方々、今までお世話になった三宅研究室諸兄にもお礼申し上げます。

## 参考文献

- [1] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47** (1975) 773
- [2] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins and K. G. Wilson, Phys. Rev. B **21** (1980) 1003
- [3] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins and K. G. Wilson, Phys. Rev. B **21** (1980) 1044
- [4] S. Yotsuhashi, K. Miyake and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 389
- [5] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124** (1961) 41
- [6] P. W. Anderson, J. Phys. C **3** (1970) 2436
- [7] Ph. Nozières and A. Blandin, J. Physique **41** (1980) 193
- [8] Ph. Nozières, J. Low Temp. Phys. **17** (1974) 31
- [9] R. Bulla, Th. Pruschke and A. C. Hewson, J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 1046
- [10] C. Gonzalez-Buxton and K. Ingersent, Phys. Rev. B **57** (1998) 14254
- [11] B. A. Jones and C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 843, B. A. Jones, C. M. Varma and J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61** (1987) 125, B. A. Jones and C. M. Varma, Phys. Rev. B **40** (1989) 324
- [12] A. Yoshimori, Prog. Theor. Phys. **55** (1976) 67
- [13] L. Mihály and A. Zawadowski, J. Physique Lett. **39** (1978) L-483
- [14] H. Shiba, Prog. Theor. Phys. **54** (1975) 967

- [15] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 3666
- [16] K. W. H. Stevens, Proc. Phys. Soc. **A65** (1952) 209
- [17] M. T. Hutchings, Solid State Phys. **16** (1965) 227
- [18] G. R. Stewart, Z. Fisk and J. L. Smith, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 679
- [19] G. Aeppli and E. Bucher Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 615
- [20] H. Tou, Y. Kitaoka, K. Asayama, N. Kimura, Y. Ōnuki, E. Yamamoto and K. Maezawa, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 1374
- [21] H. Tou, Y. Kitaoka, K. Ishida, K. Asayama, N. Kimura, Y. Ōnuki and E. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3129
- [22] A. Grauel, A. Böhm, H. Fischer, C. Geibel, R. Köhler, R. Modler, C. Schank, F. Steglich and G. Weber, Phys. Rev. B **46** (1992) 5818
- [23] R. A. Fisher, S. Kim, B. F. Woodfield and N. E. Phillips, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 1411
- [24] G. Fraunberger, M. Baldus and G. R. Stewart, Phys. Rev. B **47** (1992) 3204
- [25] R. Joynt, L. Taillefer, Rev. Mod. Phys. **74** (2002) 235
- [26] M. R. Norman, Phys. Rev. B **50** (1994) 6904
- [27] H. Ikeda and K. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3714
- [28] T. Hotta and K. Ueda, Phys. Rev. B **67** (2003) 104518
- [29] A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov and I. E. Dzyaloshinskii, (松原武生, 佐々木健, 米沢富美子 訳) 『統計物理学における場の量子論の方法』 東京図書, 1987
- [30] A. C. Hewson, “*The Kondo Problem to Heavy Fermion*”, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1993